



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 6, 2023 – 08:29 pm BST

PDB ID : 6ZYC
BMRB ID : 34545
Title : Solution structure of the C-terminal domain of the vaccinia virus DNA polymerase processivity factor component A20.
Authors : Bersch, B.; Iseni, F.; Burmeister, W.; Tarbouriech, N.
Deposited on : 2020-07-31

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

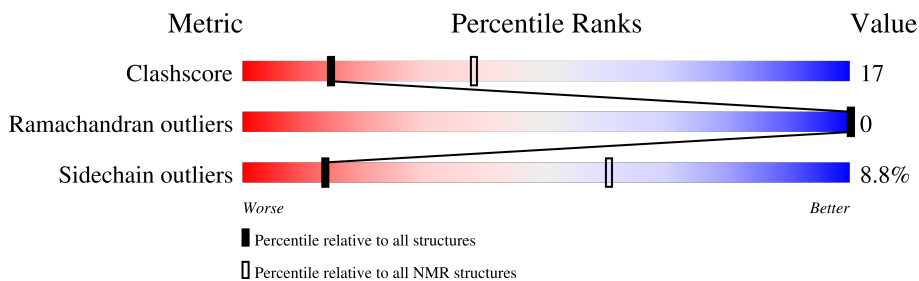
1 Overall quality at a glance

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 | 148 | |

2 Ensemble composition and analysis i

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

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

| Well-defined (core) protein residues | | | |
|--------------------------------------|-----------------------|-------------------|--------------|
| Well-defined core | Residue range (total) | Backbone RMSD (Å) | Medoid model |
| 1 | A:11-A:123 (113) | 0.28 | 1 |

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

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

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

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2324 atoms, of which 1153 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called DNA polymerase processivity factor component A20.

| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | Trace | |
|-----|-------|----------|-------|-----|------|-----|-----|-------|---|
| | | | Total | C | H | N | O | | S |
| 1 | A | 148 | 2324 | 733 | 1153 | 203 | 230 | 5 | 0 |

There are 25 discrepancies between the modelled and reference sequences:

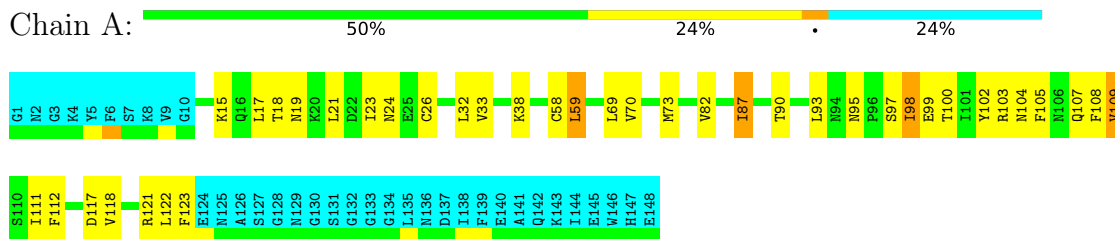
| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment | Reference |
|-------|---------|----------|--------|----------------|------------|
| A | 1 | GLY | - | expression tag | UNP P20995 |
| A | 125 | ASN | - | linker | UNP P20995 |
| A | 126 | ALA | - | linker | UNP P20995 |
| A | 127 | SER | - | linker | UNP P20995 |
| A | 128 | GLY | - | linker | UNP P20995 |
| A | 129 | ASN | - | linker | UNP P20995 |
| A | 130 | GLY | - | linker | UNP P20995 |
| A | 131 | SER | - | linker | UNP P20995 |
| A | 132 | GLY | - | linker | UNP P20995 |
| A | 133 | GLY | - | linker | UNP P20995 |
| A | 134 | GLY | - | linker | UNP P20995 |
| A | 135 | LEU | - | expression tag | UNP P20995 |
| A | 136 | ASN | - | expression tag | UNP P20995 |
| A | 137 | ASP | - | expression tag | UNP P20995 |
| A | 138 | ILE | - | expression tag | UNP P20995 |
| A | 139 | PHE | - | expression tag | UNP P20995 |
| A | 140 | GLU | - | expression tag | UNP P20995 |
| A | 141 | ALA | - | expression tag | UNP P20995 |
| A | 142 | GLN | - | expression tag | UNP P20995 |
| A | 143 | LYS | - | expression tag | UNP P20995 |
| A | 144 | ILE | - | expression tag | UNP P20995 |
| A | 145 | GLU | - | expression tag | UNP P20995 |
| A | 146 | TRP | - | expression tag | UNP P20995 |
| A | 147 | HIS | - | expression tag | UNP P20995 |
| A | 148 | GLU | - | expression tag | UNP P20995 |

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: DNA polymerase processivity factor component A20

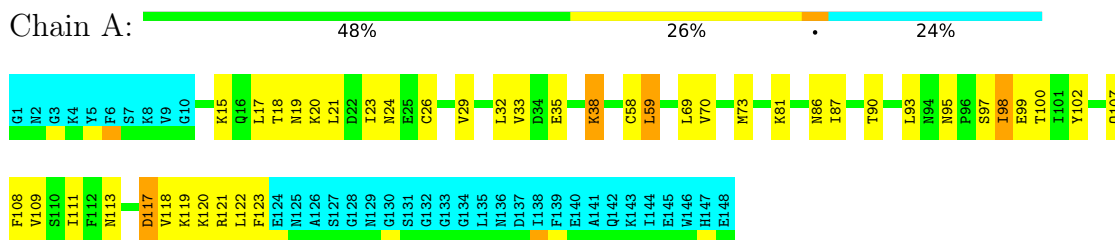


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

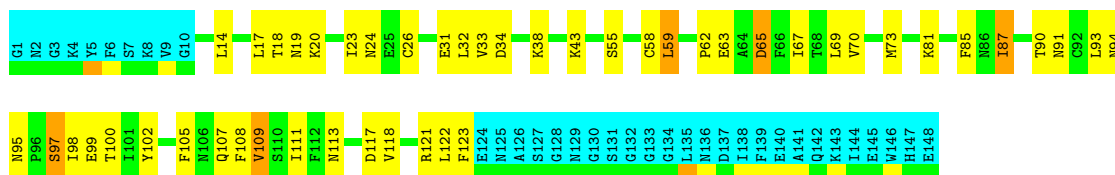
- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20



4.2.2 Score per residue for model 2

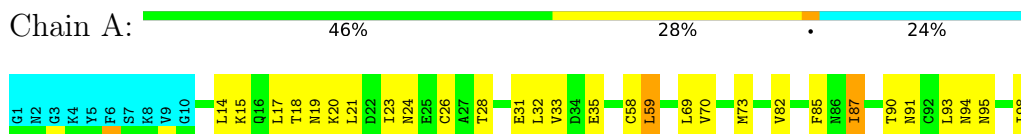
- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20





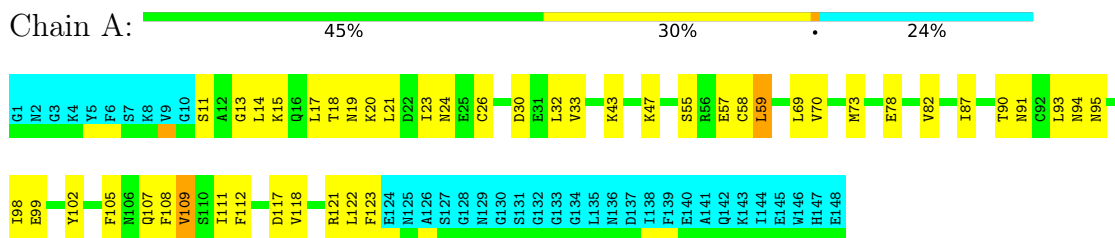
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20



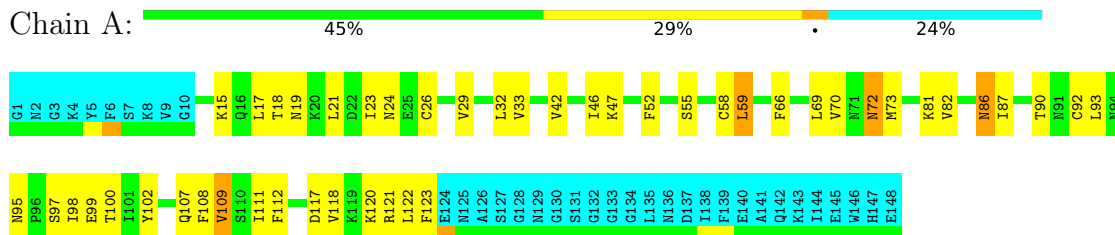
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20



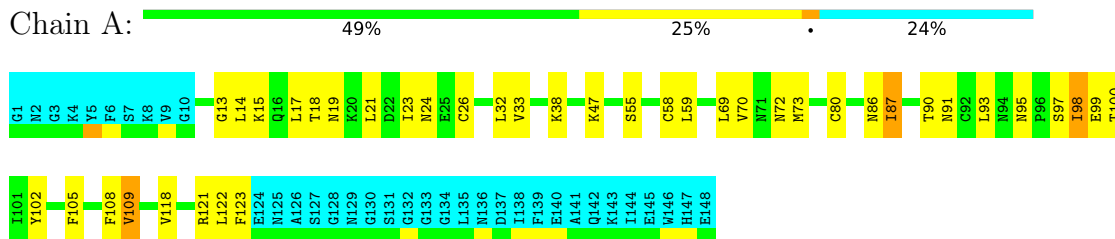
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20



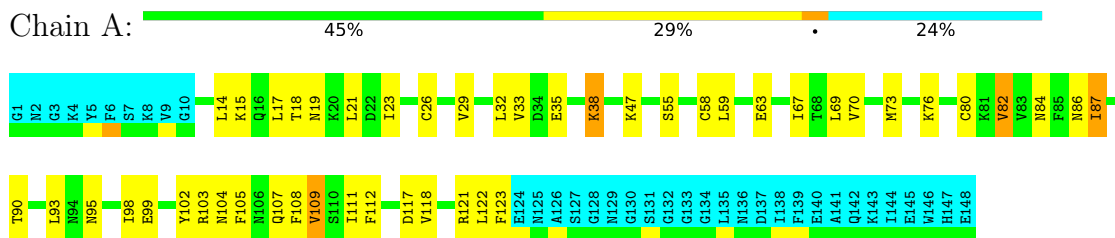
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20



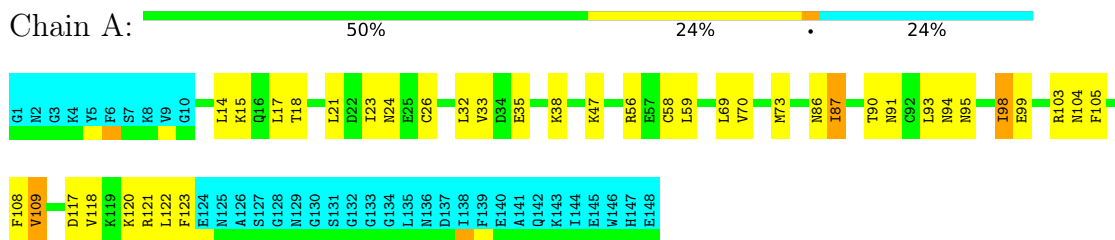
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20



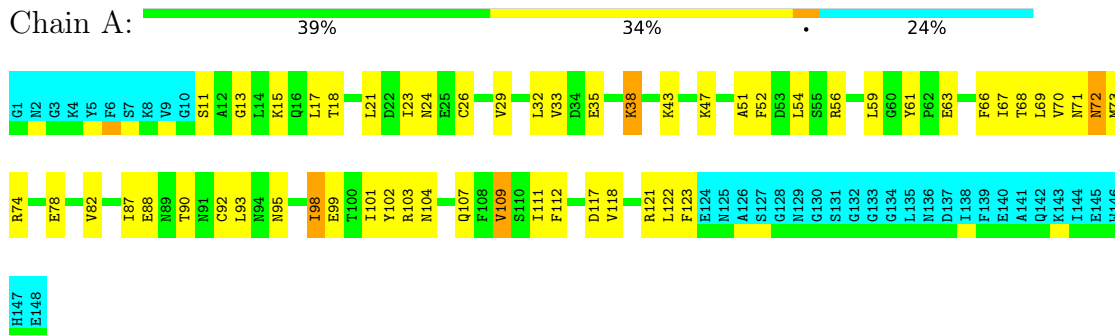
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20



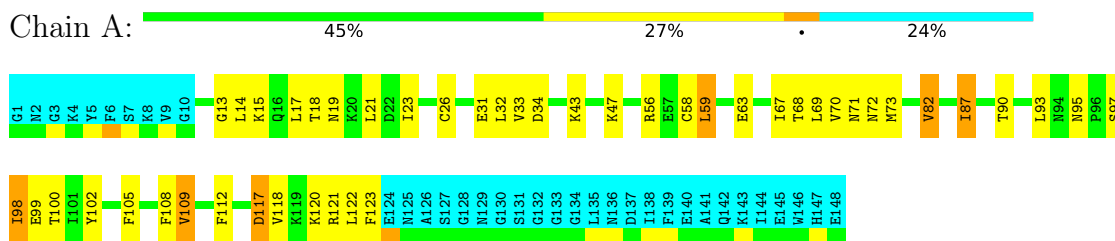
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20



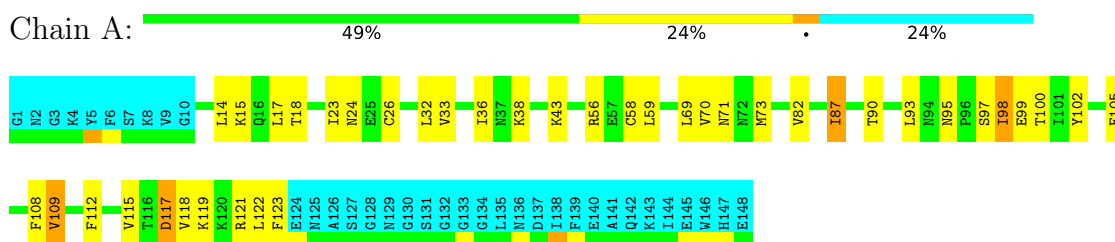
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20



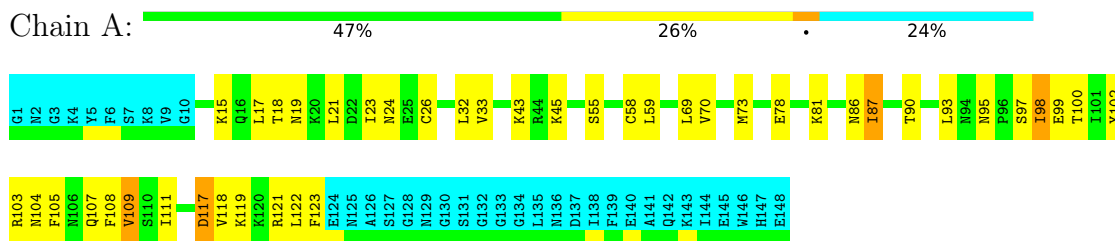
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20



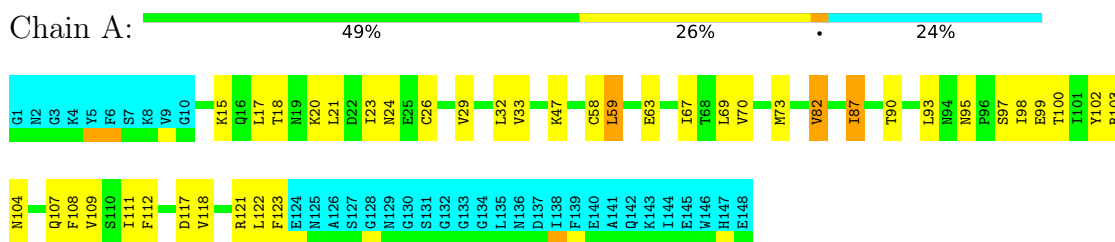
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20



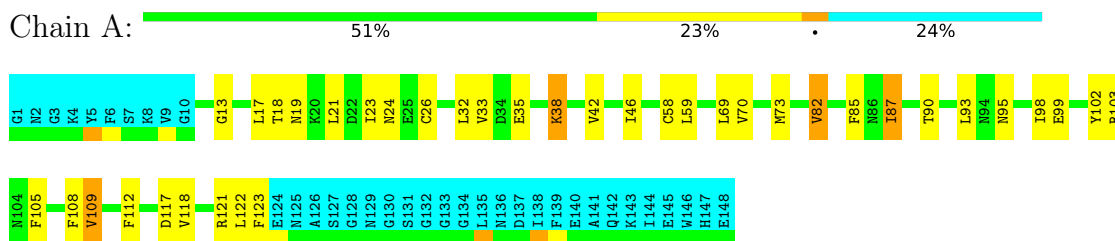
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20



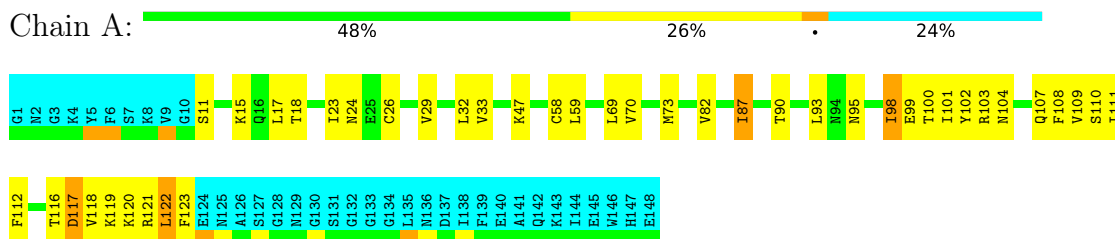
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20



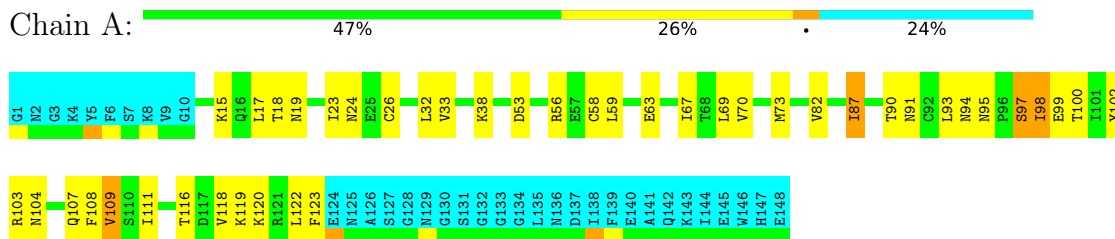
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20



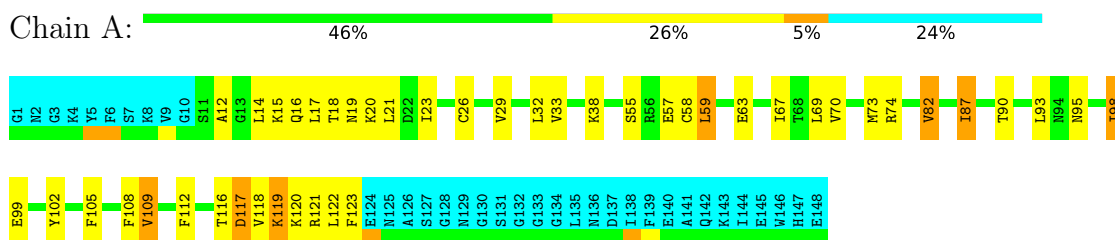
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20



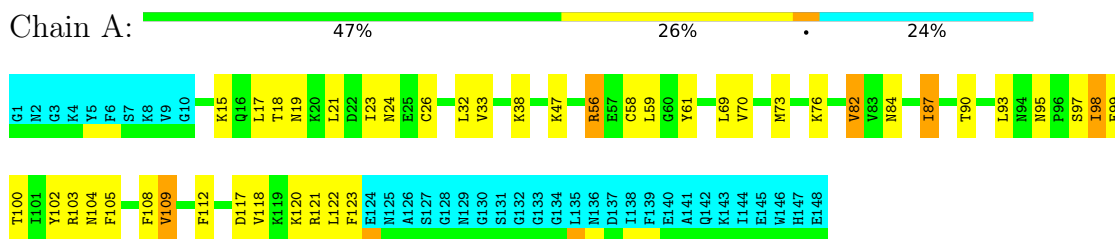
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20



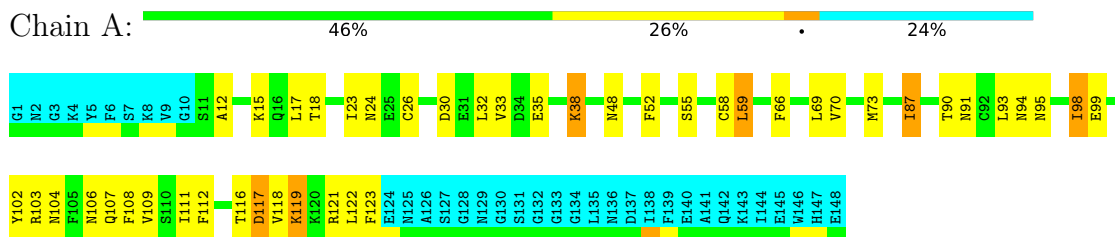
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20



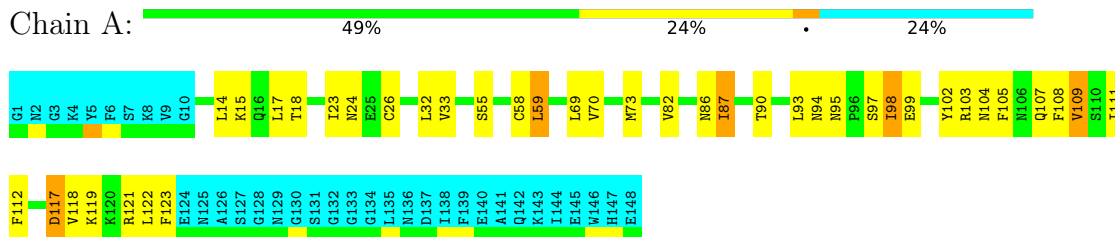
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: DNA polymerase processivity factor component A20



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 1000 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 | structure calculation | |

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 | 1674 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1674 |
| 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 | 909 | 916 | 916 | 31±4 |
| All | All | 18180 | 18320 | 18320 | 625 |

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 17.

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

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:73:MET:HG2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 0.86 | 1.44 | 19 | 18 |
| 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:93:LEU:HD23 | 0.81 | 1.50 | 19 | 19 |
| 1:A:90:THR:O | 1:A:93:LEU:HG | 0.74 | 1.83 | 16 | 20 |
| 1:A:69:LEU:HG | 1:A:73:MET:SD | 0.72 | 2.25 | 9 | 19 |
| 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:122:LEU:HD21 | 0.69 | 1.65 | 12 | 19 |
| 1:A:91:ASN:HA | 1:A:94:ASN:ND2 | 0.69 | 2.03 | 8 | 3 |
| 1:A:72:ASN:OD1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 0.68 | 1.87 | 5 | 2 |
| 1:A:26:CYS:SG | 1:A:32:LEU:HA | 0.68 | 2.29 | 8 | 20 |
| 1:A:73:MET:CG | 1:A:87:ILE:HD12 | 0.67 | 2.18 | 19 | 1 |
| 1:A:69:LEU:O | 1:A:73:MET:HG3 | 0.66 | 1.89 | 10 | 19 |
| 1:A:118:VAL:O | 1:A:122:LEU:HG | 0.64 | 1.92 | 2 | 20 |
| 1:A:17:LEU:O | 1:A:21:LEU:HG | 0.62 | 1.95 | 13 | 14 |
| 1:A:73:MET:SD | 1:A:102:TYR:CE2 | 0.62 | 2.92 | 19 | 1 |
| 1:A:117:ASP:O | 1:A:121:ARG:HG3 | 0.62 | 1.94 | 19 | 18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:93:LEU:O | 1:A:99:GLU:HG3 | 0.62 | 1.95 | 15 | 20 |
| 1:A:122:LEU:HB2 | 1:A:123:PHE:CD2 | 0.62 | 2.30 | 12 | 19 |
| 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:58:CYS:SG | 0.61 | 2.35 | 11 | 18 |
| 1:A:73:MET:SD | 1:A:102:TYR:HE2 | 0.59 | 2.19 | 19 | 1 |
| 1:A:17:LEU:HD23 | 1:A:58:CYS:SG | 0.59 | 2.37 | 4 | 1 |
| 1:A:18:THR:HA | 1:A:23:ILE:CG1 | 0.58 | 2.27 | 18 | 18 |
| 1:A:78:GLU:O | 1:A:81:LYS:HG2 | 0.58 | 1.97 | 12 | 1 |
| 1:A:30:ASP:HA | 1:A:121:ARG:NH1 | 0.56 | 2.15 | 4 | 2 |
| 1:A:117:ASP:OD1 | 1:A:121:ARG:HD2 | 0.56 | 2.01 | 5 | 2 |
| 1:A:95:ASN:HB3 | 1:A:98:ILE:CG1 | 0.54 | 2.33 | 9 | 11 |
| 1:A:115:VAL:HA | 1:A:118:VAL:HG12 | 0.53 | 1.78 | 11 | 1 |
| 1:A:73:MET:HG2 | 1:A:87:ILE:CD1 | 0.53 | 2.28 | 19 | 1 |
| 1:A:18:THR:HA | 1:A:23:ILE:HG12 | 0.52 | 1.82 | 2 | 20 |
| 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:123:PHE:CE2 | 0.52 | 2.39 | 15 | 10 |
| 1:A:63:GLU:O | 1:A:67:ILE:HB | 0.52 | 2.05 | 10 | 6 |
| 1:A:95:ASN:HB3 | 1:A:98:ILE:HG12 | 0.52 | 1.81 | 10 | 20 |
| 1:A:81:LYS:HB3 | 1:A:113:ASN:OD1 | 0.52 | 2.04 | 1 | 2 |
| 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 0.52 | 1.81 | 11 | 7 |
| 1:A:72:ASN:CG | 1:A:92:CYS:HB2 | 0.51 | 2.25 | 5 | 2 |
| 1:A:73:MET:SD | 1:A:87:ILE:HB | 0.51 | 2.46 | 19 | 1 |
| 1:A:93:LEU:HA | 1:A:98:ILE:HB | 0.51 | 1.82 | 2 | 16 |
| 1:A:35:GLU:O | 1:A:38:LYS:HG3 | 0.51 | 2.06 | 7 | 5 |
| 1:A:93:LEU:HA | 1:A:98:ILE:CB | 0.51 | 2.36 | 2 | 17 |
| 1:A:100:THR:O | 1:A:104:ASN:HB3 | 0.50 | 2.06 | 18 | 2 |
| 1:A:87:ILE:CD1 | 1:A:93:LEU:HD23 | 0.50 | 2.30 | 19 | 3 |
| 1:A:12:ALA:O | 1:A:15:LYS:HG2 | 0.50 | 2.05 | 17 | 2 |
| 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:102:TYR:CD2 | 0.49 | 2.42 | 4 | 19 |
| 1:A:116:THR:O | 1:A:119:LYS:HG2 | 0.49 | 2.08 | 15 | 2 |
| 1:A:20:LYS:CG | 1:A:58:CYS:HA | 0.49 | 2.38 | 1 | 6 |
| 1:A:23:ILE:HD11 | 1:A:32:LEU:CD2 | 0.49 | 2.37 | 3 | 12 |
| 1:A:82:VAL:HG12 | 1:A:112:PHE:CD2 | 0.49 | 2.43 | 14 | 10 |
| 1:A:55:SER:OG | 1:A:112:PHE:HA | 0.48 | 2.08 | 19 | 3 |
| 1:A:97:SER:O | 1:A:100:THR:HB | 0.48 | 2.08 | 11 | 10 |
| 1:A:47:LYS:HB2 | 1:A:123:PHE:CE1 | 0.48 | 2.43 | 4 | 10 |
| 1:A:11:SER:O | 1:A:15:LYS:HB3 | 0.48 | 2.08 | 9 | 3 |
| 1:A:59:LEU:HD21 | 1:A:108:PHE:HA | 0.48 | 1.84 | 7 | 19 |
| 1:A:107:GLN:O | 1:A:111:ILE:HG13 | 0.48 | 2.09 | 9 | 13 |
| 1:A:35:GLU:O | 1:A:38:LYS:HG2 | 0.48 | 2.09 | 8 | 1 |
| 1:A:14:LEU:O | 1:A:18:THR:HG23 | 0.47 | 2.09 | 4 | 10 |
| 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:104:ASN:N | 0.47 | 2.25 | 12 | 9 |
| 1:A:73:MET:CG | 1:A:87:ILE:HA | 0.47 | 2.40 | 19 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:82:VAL:HG13 | 1:A:109:VAL:HB | 0.46 | 1.85 | 7 | 9 |
| 1:A:23:ILE:HB | 1:A:35:GLU:OE2 | 0.46 | 2.11 | 3 | 1 |
| 1:A:76:LYS:HB2 | 1:A:84:ASN:HB3 | 0.46 | 1.87 | 18 | 1 |
| 1:A:91:ASN:O | 1:A:94:ASN:HB2 | 0.46 | 2.10 | 19 | 1 |
| 1:A:55:SER:O | 1:A:59:LEU:HD22 | 0.46 | 2.11 | 4 | 9 |
| 1:A:61:TYR:CE1 | 1:A:101:ILE:HG23 | 0.45 | 2.46 | 9 | 1 |
| 1:A:105:PHE:O | 1:A:109:VAL:HG13 | 0.45 | 2.11 | 8 | 13 |
| 1:A:73:MET:HB3 | 1:A:86:ASN:O | 0.45 | 2.11 | 5 | 5 |
| 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:122:LEU:CD2 | 0.45 | 2.41 | 11 | 2 |
| 1:A:31:GLU:O | 1:A:34:ASP:HB3 | 0.45 | 2.12 | 2 | 2 |
| 1:A:56:ARG:HG2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 0.44 | 1.88 | 9 | 2 |
| 1:A:68:THR:O | 1:A:71:ASN:HB3 | 0.44 | 2.13 | 10 | 2 |
| 1:A:52:PHE:CZ | 1:A:66:PHE:CE2 | 0.44 | 3.06 | 19 | 3 |
| 1:A:20:LYS:HG2 | 1:A:58:CYS:HA | 0.44 | 1.90 | 2 | 5 |
| 1:A:85:PHE:CD1 | 1:A:109:VAL:HG11 | 0.44 | 2.48 | 2 | 3 |
| 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:118:VAL:HG21 | 0.44 | 1.89 | 11 | 1 |
| 1:A:87:ILE:HG21 | 1:A:90:THR:HG22 | 0.43 | 1.90 | 1 | 1 |
| 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:123:PHE:HE2 | 0.43 | 1.74 | 7 | 1 |
| 1:A:116:THR:O | 1:A:119:LYS:HG3 | 0.43 | 2.13 | 17 | 1 |
| 1:A:56:ARG:O | 1:A:61:TYR:HB2 | 0.43 | 2.14 | 18 | 1 |
| 1:A:91:ASN:HA | 1:A:94:ASN:OD1 | 0.42 | 2.14 | 2 | 1 |
| 1:A:59:LEU:HD21 | 1:A:111:ILE:CD1 | 0.42 | 2.44 | 9 | 1 |
| 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:101:ILE:HG22 | 0.42 | 1.91 | 9 | 2 |
| 1:A:116:THR:HA | 1:A:119:LYS:CG | 0.42 | 2.45 | 19 | 1 |
| 1:A:28:THR:OG1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 0.42 | 2.15 | 3 | 1 |
| 1:A:56:ARG:CZ | 1:A:63:GLU:HG2 | 0.42 | 2.45 | 9 | 1 |
| 1:A:115:VAL:O | 1:A:118:VAL:HG12 | 0.42 | 2.15 | 11 | 1 |
| 1:A:33:VAL:CG1 | 1:A:122:LEU:HD21 | 0.42 | 2.43 | 17 | 1 |
| 1:A:74:ARG:HB2 | 1:A:88:GLU:CG | 0.41 | 2.45 | 9 | 1 |
| 1:A:82:VAL:HG23 | 1:A:112:PHE:CD2 | 0.41 | 2.50 | 11 | 1 |
| 1:A:42:VAL:O | 1:A:46:ILE:HG12 | 0.41 | 2.14 | 14 | 2 |
| 1:A:20:LYS:HE2 | 1:A:57:GLU:O | 0.41 | 2.15 | 17 | 1 |
| 1:A:20:LYS:HE3 | 1:A:57:GLU:O | 0.41 | 2.15 | 4 | 1 |
| 1:A:76:LYS:HB2 | 1:A:84:ASN:HB2 | 0.41 | 1.92 | 7 | 1 |
| 1:A:73:MET:HA | 1:A:87:ILE:HA | 0.41 | 1.92 | 5 | 3 |
| 1:A:81:LYS:HB2 | 1:A:81:LYS:NZ | 0.41 | 2.31 | 5 | 1 |
| 1:A:56:ARG:HD2 | 1:A:56:ARG:C | 0.41 | 2.36 | 10 | 1 |
| 1:A:26:CYS:SG | 1:A:32:LEU:HD23 | 0.41 | 2.56 | 20 | 1 |
| 1:A:62:PRO:HB2 | 1:A:65:ASP:OD2 | 0.41 | 2.15 | 2 | 1 |
| 1:A:99:GLU:O | 1:A:103:ARG:HG2 | 0.41 | 2.16 | 15 | 3 |
| 1:A:93:LEU:O | 1:A:98:ILE:HB | 0.41 | 2.16 | 11 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:69:LEU:HA | 1:A:72:ASN:HD21 | 0.40 | 1.75 | 5 | 1 |
| 1:A:51:ALA:HA | 1:A:54:LEU:HD12 | 0.40 | 1.94 | 9 | 1 |
| 1:A:82:VAL:CG1 | 1:A:109:VAL:HB | 0.40 | 2.47 | 5 | 1 |
| 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:115:VAL:CG2 | 0.40 | 2.46 | 3 | 1 |
| 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:119:LYS:N | 0.40 | 2.31 | 11 | 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 | 113/148 (76%) | 110±1 (97±1%) | 3±1 (3±1%) | 0±0 (0±0%) | 100 | 100 |
| All | All | 2260/2960 (76%) | 2199 (97%) | 61 (3%) | 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 | 106/131 (81%) | 97±2 (91±2%) | 9±2 (9±2%) | 13 | 60 |
| All | All | 2120/2620 (81%) | 1933 (91%) | 187 (9%) | 13 | 60 |

All 29 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 | 70 | VAL | 20 |
| 1 | A | 109 | VAL | 20 |
| 1 | A | 24 | ASN | 17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 87 | ILE | 16 |
| 1 | A | 15 | LYS | 13 |
| 1 | A | 19 | ASN | 13 |
| 1 | A | 98 | ILE | 13 |
| 1 | A | 38 | LYS | 11 |
| 1 | A | 59 | LEU | 10 |
| 1 | A | 117 | ASP | 8 |
| 1 | A | 43 | LYS | 6 |
| 1 | A | 82 | VAL | 6 |
| 1 | A | 119 | LYS | 5 |
| 1 | A | 72 | ASN | 4 |
| 1 | A | 56 | ARG | 4 |
| 1 | A | 86 | ASN | 3 |
| 1 | A | 97 | SER | 3 |
| 1 | A | 91 | ASN | 2 |
| 1 | A | 94 | ASN | 2 |
| 1 | A | 78 | GLU | 2 |
| 1 | A | 65 | ASP | 1 |
| 1 | A | 67 | ILE | 1 |
| 1 | A | 71 | ASN | 1 |
| 1 | A | 45 | LYS | 1 |
| 1 | A | 122 | LEU | 1 |
| 1 | A | 53 | ASP | 1 |
| 1 | A | 16 | GLN | 1 |
| 1 | A | 74 | ARG | 1 |
| 1 | A | 48 | 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 83% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: starch_output

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 | 1674 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1674 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Number of shift outliers (ShiftChecker) | 0 |

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 |
|------------------------|----------|---------------------------------|-------------------------|
| $^{13}\text{C}_\alpha$ | 141 | -0.63 ± 0.08 | Should be checked |
| $^{13}\text{C}_\beta$ | 133 | 0.16 ± 0.13 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}\text{C}'$ | 144 | -0.23 ± 0.09 | None needed (< 0.5 ppm) |
| ^{15}N | 144 | 0.56 ± 0.20 | Should be applied |

7.1.3 Completeness of resonance assignments (i)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 86%, i.e. 1363 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1584. 0 out of 19 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ^1H | ^{13}C | ^{15}N |
|-----------|----------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone | 562/564 (100%) | 227/227 (100%) | 224/226 (99%) | 111/111 (100%) |
| Sidechain | 754/922 (82%) | 514/592 (87%) | 225/286 (79%) | 15/44 (34%) |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| | Total | ¹ H | ¹³ C | ¹⁵ N |
|----------|-----------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Aromatic | 47/98 (48%) | 47/48 (98%) | 0/50 (0%) | 0/0 (—%) |
| Overall | 1363/1584 (86%) | 788/867 (91%) | 449/562 (80%) | 126/155 (81%) |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 83%, i.e. 1674 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2006. 0 out of 21 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ¹ H | ¹³ C | ¹⁵ N |
|-----------|-----------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone | 720/747 (96%) | 291/305 (95%) | 285/296 (96%) | 144/146 (99%) |
| Sidechain | 889/1112 (80%) | 606/712 (85%) | 266/348 (76%) | 17/52 (33%) |
| Aromatic | 65/147 (44%) | 64/72 (89%) | 0/72 (0%) | 1/3 (33%) |
| Overall | 1674/2006 (83%) | 961/1089 (88%) | 551/716 (77%) | 162/201 (81%) |

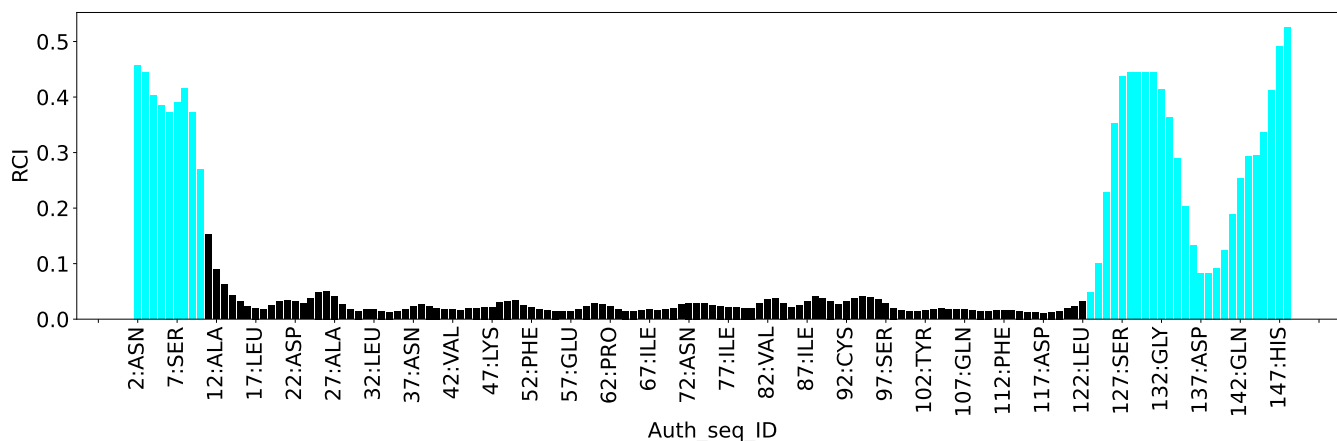
7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

There are no statistically unusual chemical shifts.

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 | 2917 |
| Intra-residue ($ i-j =0$) | 1194 |
| Sequential ($ i-j =1$) | 637 |
| Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$) | 514 |
| Long range ($ i-j \geq 5$) | 572 |
| Inter-chain | 0 |
| Hydrogen bond restraints | 0 |
| Disulfide bond restraints | 0 |
| Total dihedral-angle restraints | 218 |
| Number of unmapped restraints | 0 |
| Number of restraints per residue | 21.2 |
| Number of long range restraints per residue ¹ | 3.9 |

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) | 149.8 | 0.2 |
| 0.2-0.5 (Medium) | 93.0 | 0.5 |
| >0.5 (Large) | 84.3 | 3.09 |

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

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

| Bins (°) | Average number of violations per model | Max (°) |
|--------------------|--|---------|
| 1.0-10.0 (Small) | 18.9 | 5.1 |
| 10.0-20.0 (Medium) | None | None |
| >20.0 (Large) | None | None |

9 Distance violation analysis [i](#)

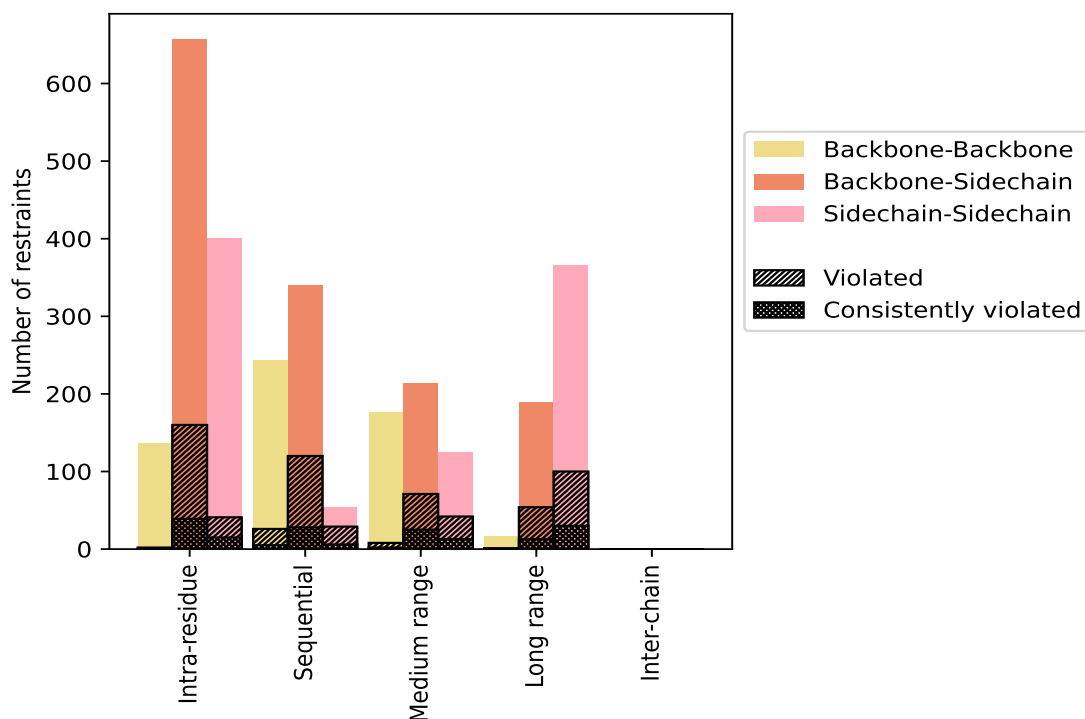
9.1 Summary of distance violations [i](#)

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

| Restrains type | Count | % ¹ | Violated ³ | | | Consistently Violated ⁴ | | |
|---|-------------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
| | | | Count | % ² | % ¹ | Count | % ² | % ¹ |
| Intra-residue ($i-j =0$) | 1194 | 40.9 | 203 | 17.0 | 7.0 | 54 | 4.5 | 1.9 |
| Backbone-Backbone | 136 | 4.7 | 2 | 1.5 | 0.1 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 657 | 22.5 | 160 | 24.4 | 5.5 | 39 | 5.9 | 1.3 |
| Sidechain-Sidechain | 401 | 13.7 | 41 | 10.2 | 1.4 | 15 | 3.7 | 0.5 |
| Sequential ($i-j =1$) | 637 | 21.8 | 175 | 27.5 | 6.0 | 39 | 6.1 | 1.3 |
| Backbone-Backbone | 243 | 8.3 | 26 | 10.7 | 0.9 | 5 | 2.1 | 0.2 |
| Backbone-Sidechain | 340 | 11.7 | 120 | 35.3 | 4.1 | 28 | 8.2 | 1.0 |
| Sidechain-Sidechain | 54 | 1.9 | 29 | 53.7 | 1.0 | 6 | 11.1 | 0.2 |
| Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$) | 514 | 17.6 | 121 | 23.5 | 4.1 | 40 | 7.8 | 1.4 |
| Backbone-Backbone | 176 | 6.0 | 8 | 4.5 | 0.3 | 2 | 1.1 | 0.1 |
| Backbone-Sidechain | 213 | 7.3 | 71 | 33.3 | 2.4 | 25 | 11.7 | 0.9 |
| Sidechain-Sidechain | 125 | 4.3 | 42 | 33.6 | 1.4 | 13 | 10.4 | 0.4 |
| Long range ($i-j \geq 5$) | 572 | 19.6 | 155 | 27.1 | 5.3 | 44 | 7.7 | 1.5 |
| Backbone-Backbone | 17 | 0.6 | 1 | 5.9 | 0.0 | 1 | 5.9 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 189 | 6.5 | 54 | 28.6 | 1.9 | 13 | 6.9 | 0.4 |
| Sidechain-Sidechain | 366 | 12.5 | 100 | 27.3 | 3.4 | 30 | 8.2 | 1.0 |
| Inter-chain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Hydrogen bond | 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 | 2917 | 100.0 | 654 | 22.4 | 22.4 | 177 | 6.1 | 6.1 |
| Backbone-Backbone | 572 | 19.6 | 37 | 6.5 | 1.3 | 8 | 1.4 | 0.3 |
| Backbone-Sidechain | 1399 | 48.0 | 405 | 28.9 | 13.9 | 105 | 7.5 | 3.6 |
| Sidechain-Sidechain | 946 | 32.4 | 212 | 22.4 | 7.3 | 64 | 6.8 | 2.2 |

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 | 97 | 82 | 68 | 75 | 0 | 322 | 0.42 | 2.28 | 0.4 | 0.24 |
| 2 | 95 | 88 | 70 | 78 | 0 | 331 | 0.39 | 1.74 | 0.37 | 0.21 |
| 3 | 86 | 86 | 72 | 79 | 0 | 323 | 0.39 | 2.77 | 0.39 | 0.21 |
| 4 | 95 | 94 | 70 | 78 | 0 | 337 | 0.42 | 2.6 | 0.39 | 0.24 |
| 5 | 95 | 84 | 68 | 84 | 0 | 331 | 0.4 | 2.87 | 0.39 | 0.22 |
| 6 | 90 | 84 | 63 | 72 | 0 | 309 | 0.4 | 2.65 | 0.38 | 0.24 |
| 7 | 99 | 85 | 63 | 72 | 0 | 319 | 0.41 | 2.49 | 0.39 | 0.22 |
| 8 | 92 | 90 | 68 | 77 | 0 | 327 | 0.39 | 2.65 | 0.39 | 0.21 |
| 9 | 103 | 86 | 68 | 85 | 0 | 342 | 0.43 | 2.85 | 0.44 | 0.24 |
| 10 | 94 | 92 | 68 | 84 | 0 | 338 | 0.39 | 2.68 | 0.38 | 0.22 |
| 11 | 101 | 90 | 73 | 79 | 0 | 343 | 0.43 | 2.51 | 0.41 | 0.24 |

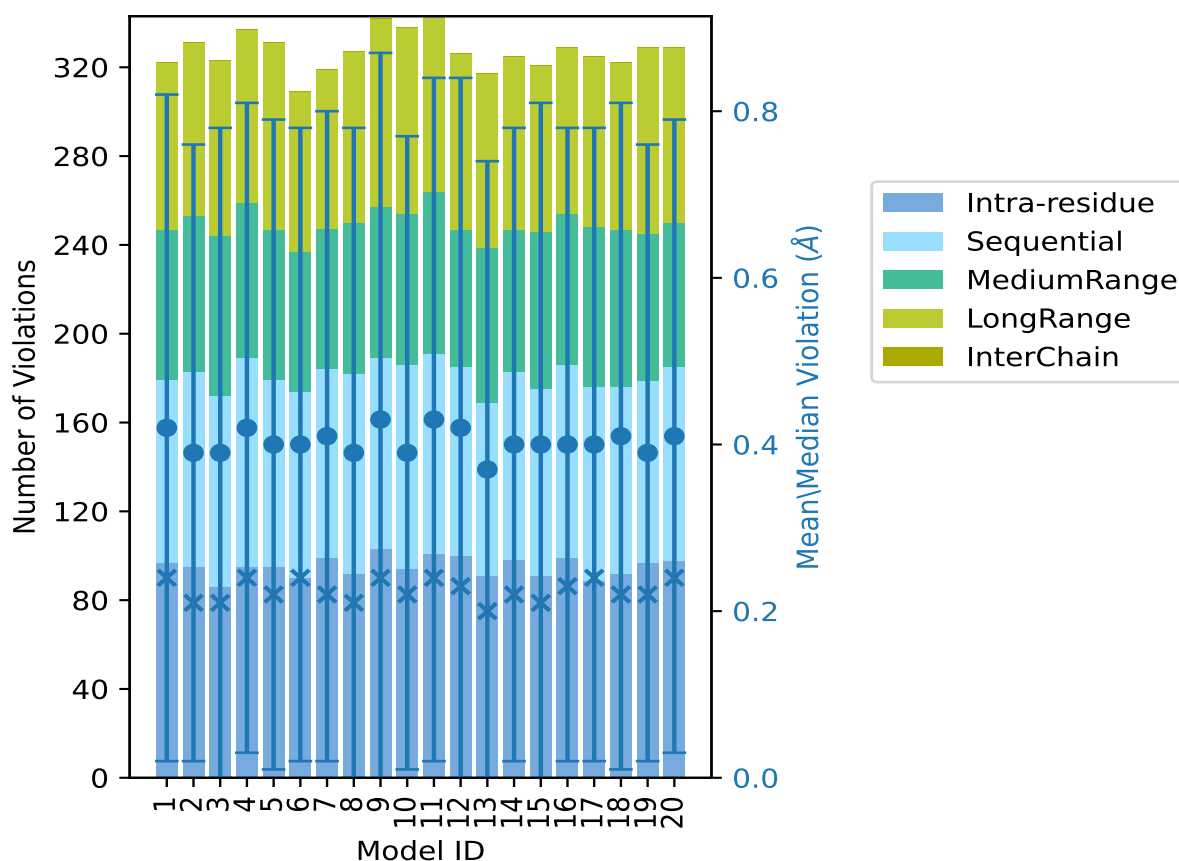
Continued on next page...

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 | 100 | 85 | 62 | 79 | 0 | 326 | 0.42 | 2.92 | 0.42 | 0.23 |
| 13 | 91 | 78 | 70 | 78 | 0 | 317 | 0.37 | 2.64 | 0.37 | 0.2 |
| 14 | 98 | 85 | 64 | 78 | 0 | 325 | 0.4 | 2.54 | 0.38 | 0.22 |
| 15 | 91 | 84 | 71 | 75 | 0 | 321 | 0.4 | 3.09 | 0.41 | 0.21 |
| 16 | 99 | 87 | 68 | 75 | 0 | 329 | 0.4 | 2.35 | 0.38 | 0.23 |
| 17 | 89 | 87 | 72 | 77 | 0 | 325 | 0.4 | 2.44 | 0.38 | 0.24 |
| 18 | 92 | 84 | 71 | 75 | 0 | 322 | 0.41 | 2.84 | 0.4 | 0.22 |
| 19 | 97 | 82 | 66 | 84 | 0 | 329 | 0.39 | 2.43 | 0.37 | 0.22 |
| 20 | 98 | 87 | 65 | 79 | 0 | 329 | 0.41 | 2.44 | 0.38 | 0.24 |

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

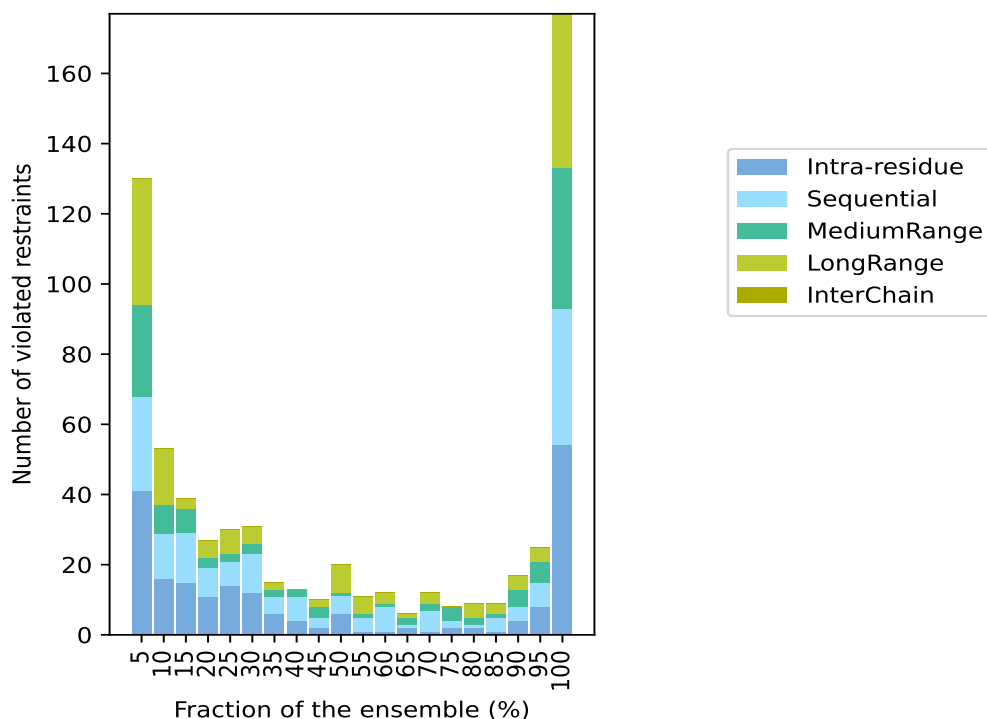
9.3 Distance violation statistics for the ensemble

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, 2263(IR:991, SQ:462, MR:393, LR:417, 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 | % |
| 41 | 27 | 26 | 36 | 0 | 130 | 1 | 5.0 |
| 16 | 13 | 8 | 16 | 0 | 53 | 2 | 10.0 |
| 15 | 14 | 7 | 3 | 0 | 39 | 3 | 15.0 |
| 11 | 8 | 3 | 5 | 0 | 27 | 4 | 20.0 |
| 14 | 7 | 2 | 7 | 0 | 30 | 5 | 25.0 |
| 12 | 11 | 3 | 5 | 0 | 31 | 6 | 30.0 |
| 6 | 5 | 2 | 2 | 0 | 15 | 7 | 35.0 |
| 4 | 7 | 2 | 0 | 0 | 13 | 8 | 40.0 |
| 2 | 3 | 3 | 2 | 0 | 10 | 9 | 45.0 |
| 6 | 5 | 1 | 8 | 0 | 20 | 10 | 50.0 |
| 1 | 4 | 1 | 5 | 0 | 11 | 11 | 55.0 |
| 1 | 7 | 1 | 3 | 0 | 12 | 12 | 60.0 |
| 2 | 1 | 2 | 1 | 0 | 6 | 13 | 65.0 |
| 1 | 6 | 2 | 3 | 0 | 12 | 14 | 70.0 |
| 2 | 2 | 4 | 0 | 0 | 8 | 15 | 75.0 |
| 2 | 1 | 2 | 4 | 0 | 9 | 16 | 80.0 |
| 1 | 4 | 1 | 3 | 0 | 9 | 17 | 85.0 |
| 4 | 4 | 5 | 4 | 0 | 17 | 18 | 90.0 |
| 8 | 7 | 6 | 4 | 0 | 25 | 19 | 95.0 |
| 54 | 39 | 40 | 44 | 0 | 177 | 20 | 100.0 |

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

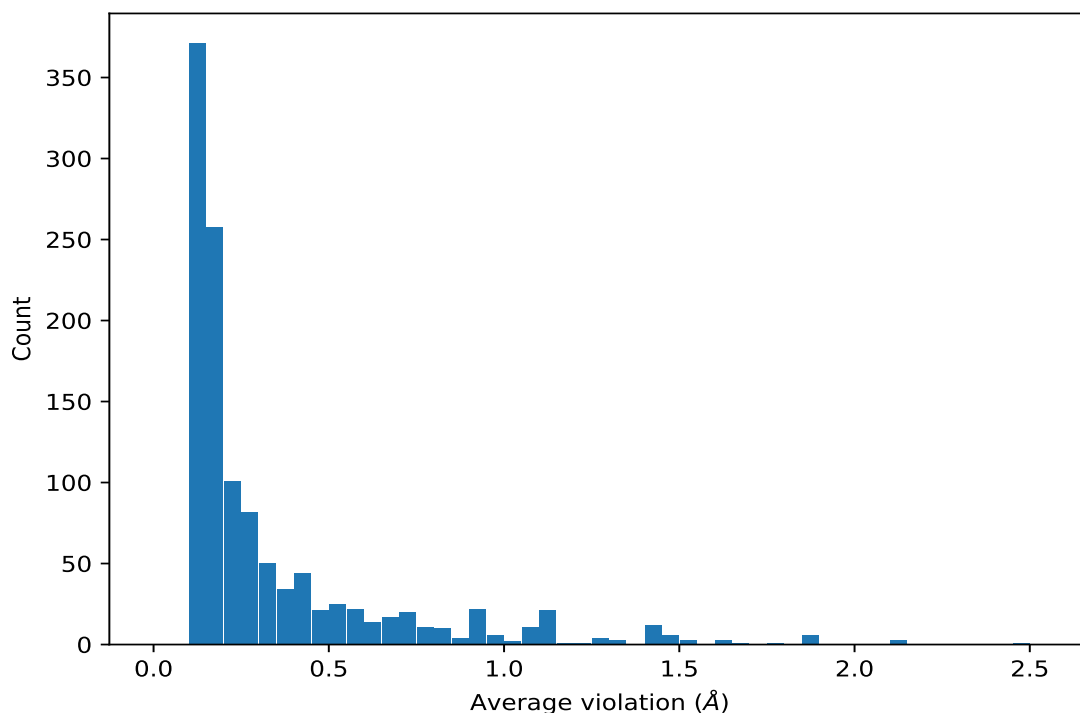
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [\(i\)](#)



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) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 20 | 2.49 | 0.38 | 2.52 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 20 | 1.76 | 0.03 | 1.76 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 20 | 1.64 | 0.02 | 1.65 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 20 | 1.61 | 0.07 | 1.59 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 20 | 1.61 | 0.04 | 1.62 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 20 | 1.51 | 0.02 | 1.51 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 20 | 1.51 | 0.02 | 1.51 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 20 | 1.51 | 0.02 | 1.51 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 20 | 1.46 | 0.16 | 1.52 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 20 | 1.45 | 0.29 | 1.47 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 20 | 1.44 | 0.1 | 1.45 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 20 | 1.44 | 0.1 | 1.45 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 20 | 1.44 | 0.1 | 1.45 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 20 | 1.44 | 0.1 | 1.45 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 20 | 1.44 | 0.1 | 1.45 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 20 | 1.44 | 0.1 | 1.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 20 | 1.44 | 0.1 | 1.45 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 20 | 1.44 | 0.1 | 1.45 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 20 | 1.44 | 0.1 | 1.45 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 1.43 | 0.04 | 1.44 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 1.43 | 0.04 | 1.44 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 1.43 | 0.04 | 1.44 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 20 | 1.3 | 0.06 | 1.32 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 20 | 1.29 | 0.04 | 1.28 |
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 20 | 1.22 | 0.15 | 1.25 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 20 | 1.17 | 0.21 | 1.19 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 20 | 1.14 | 0.29 | 1.25 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 20 | 1.14 | 0.29 | 1.25 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 20 | 1.14 | 0.24 | 1.18 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 20 | 1.11 | 0.08 | 1.12 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 20 | 1.11 | 0.08 | 1.12 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 20 | 1.11 | 0.06 | 1.12 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 20 | 1.11 | 0.06 | 1.12 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 20 | 1.11 | 0.06 | 1.12 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 20 | 1.11 | 0.06 | 1.12 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 20 | 1.11 | 0.06 | 1.12 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 20 | 1.11 | 0.06 | 1.12 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 20 | 1.11 | 0.06 | 1.12 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 20 | 1.11 | 0.06 | 1.12 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 20 | 1.11 | 0.06 | 1.12 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 20 | 1.07 | 0.56 | 1.48 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 20 | 1.07 | 0.56 | 1.48 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 20 | 1.07 | 0.56 | 1.48 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 20 | 1.06 | 0.34 | 1.16 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 20 | 1.02 | 0.44 | 1.1 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 20 | 0.94 | 0.0 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 20 | 0.94 | 0.0 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 20 | 0.94 | 0.0 | 0.94 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 20 | 0.93 | 0.08 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 20 | 0.93 | 0.08 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 20 | 0.93 | 0.08 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 20 | 0.93 | 0.08 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 20 | 0.93 | 0.08 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 20 | 0.93 | 0.08 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 20 | 0.93 | 0.08 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 20 | 0.93 | 0.08 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 20 | 0.93 | 0.08 | 0.92 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 20 | 0.92 | 0.08 | 0.94 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 20 | 0.92 | 0.08 | 0.94 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 20 | 0.92 | 0.08 | 0.94 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 20 | 0.92 | 0.05 | 0.91 |
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 20 | 0.91 | 0.1 | 0.9 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 20 | 0.88 | 0.24 | 0.88 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 20 | 0.87 | 0.1 | 0.9 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 20 | 0.87 | 0.21 | 0.88 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 20 | 0.87 | 0.05 | 0.88 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 20 | 0.83 | 0.09 | 0.84 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 20 | 0.83 | 0.09 | 0.84 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 20 | 0.83 | 0.09 | 0.84 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 0.82 | 0.05 | 0.84 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 20 | 0.82 | 0.16 | 0.82 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 20 | 0.82 | 0.16 | 0.82 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 20 | 0.82 | 0.16 | 0.82 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 20 | 0.82 | 0.01 | 0.82 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 20 | 0.78 | 0.07 | 0.8 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 20 | 0.77 | 0.01 | 0.76 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 20 | 0.77 | 0.07 | 0.76 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 20 | 0.76 | 0.2 | 0.78 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 20 | 0.76 | 0.2 | 0.78 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 20 | 0.76 | 0.2 | 0.78 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 20 | 0.75 | 0.1 | 0.71 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 20 | 0.75 | 0.03 | 0.75 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 20 | 0.75 | 0.03 | 0.75 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 20 | 0.75 | 0.03 | 0.75 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 20 | 0.75 | 0.06 | 0.74 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 20 | 0.74 | 0.04 | 0.73 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 20 | 0.72 | 0.07 | 0.72 |
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 20 | 0.71 | 0.02 | 0.71 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 20 | 0.71 | 0.18 | 0.64 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 20 | 0.71 | 0.18 | 0.64 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 20 | 0.7 | 0.05 | 0.7 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 20 | 0.7 | 0.05 | 0.7 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 20 | 0.7 | 0.05 | 0.7 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 20 | 0.7 | 0.05 | 0.7 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 20 | 0.7 | 0.05 | 0.7 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 20 | 0.7 | 0.05 | 0.7 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 20 | 0.68 | 0.03 | 0.68 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 20 | 0.67 | 0.01 | 0.67 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 20 | 0.65 | 0.0 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 20 | 0.65 | 0.0 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 20 | 0.65 | 0.0 | 0.65 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 20 | 0.65 | 0.09 | 0.66 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 20 | 0.65 | 0.09 | 0.66 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 20 | 0.64 | 0.09 | 0.64 |
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 20 | 0.62 | 0.01 | 0.63 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 20 | 0.62 | 0.05 | 0.62 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 20 | 0.6 | 0.14 | 0.54 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 20 | 0.58 | 0.02 | 0.58 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 20 | 0.58 | 0.09 | 0.59 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 20 | 0.56 | 0.29 | 0.48 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 20 | 0.56 | 0.29 | 0.48 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 20 | 0.56 | 0.29 | 0.48 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.55 | 0.14 | 0.53 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 20 | 0.54 | 0.04 | 0.55 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 20 | 0.54 | 0.42 | 0.43 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 20 | 0.53 | 0.03 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 20 | 0.53 | 0.03 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 20 | 0.53 | 0.03 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 20 | 0.53 | 0.03 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 20 | 0.53 | 0.03 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 20 | 0.53 | 0.03 | 0.53 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 20 | 0.52 | 0.18 | 0.56 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 20 | 0.5 | 0.08 | 0.52 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 20 | 0.5 | 0.02 | 0.5 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 20 | 0.48 | 0.05 | 0.47 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 20 | 0.48 | 0.0 | 0.48 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 20 | 0.47 | 0.04 | 0.47 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 20 | 0.46 | 0.43 | 0.23 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 20 | 0.46 | 0.43 | 0.23 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 20 | 0.46 | 0.43 | 0.23 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 20 | 0.46 | 0.02 | 0.46 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 20 | 0.44 | 0.13 | 0.42 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 20 | 0.43 | 0.01 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 20 | 0.43 | 0.01 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 20 | 0.43 | 0.01 | 0.43 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 20 | 0.43 | 0.2 | 0.48 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 20 | 0.43 | 0.11 | 0.42 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 20 | 0.43 | 0.06 | 0.4 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 20 | 0.43 | 0.06 | 0.4 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 20 | 0.43 | 0.06 | 0.4 |
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 20 | 0.42 | 0.13 | 0.38 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 20 | 0.42 | 0.02 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 20 | 0.41 | 0.04 | 0.41 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 20 | 0.41 | 0.04 | 0.41 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 20 | 0.4 | 0.18 | 0.36 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 20 | 0.4 | 0.18 | 0.36 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 20 | 0.4 | 0.18 | 0.36 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 20 | 0.4 | 0.18 | 0.36 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 20 | 0.4 | 0.18 | 0.36 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 20 | 0.4 | 0.18 | 0.36 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 20 | 0.4 | 0.02 | 0.4 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 20 | 0.4 | 0.14 | 0.36 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 20 | 0.4 | 0.1 | 0.43 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 20 | 0.4 | 0.1 | 0.43 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 20 | 0.39 | 0.02 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 20 | 0.39 | 0.02 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 20 | 0.39 | 0.02 | 0.39 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 20 | 0.39 | 0.03 | 0.4 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 20 | 0.38 | 0.03 | 0.38 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 20 | 0.38 | 0.09 | 0.42 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 20 | 0.38 | 0.09 | 0.42 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 20 | 0.38 | 0.03 | 0.39 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 20 | 0.37 | 0.03 | 0.36 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 20 | 0.37 | 0.03 | 0.36 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 20 | 0.37 | 0.03 | 0.36 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 20 | 0.35 | 0.06 | 0.36 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 20 | 0.35 | 0.06 | 0.36 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 20 | 0.35 | 0.04 | 0.34 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 20 | 0.35 | 0.04 | 0.34 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 20 | 0.34 | 0.02 | 0.34 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 20 | 0.34 | 0.02 | 0.34 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 20 | 0.34 | 0.02 | 0.34 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 20 | 0.34 | 0.0 | 0.34 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 20 | 0.33 | 0.1 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 20 | 0.33 | 0.1 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 20 | 0.33 | 0.1 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 20 | 0.33 | 0.1 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 20 | 0.33 | 0.1 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 20 | 0.33 | 0.1 | 0.31 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 20 | 0.32 | 0.11 | 0.28 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 20 | 0.32 | 0.11 | 0.28 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 20 | 0.32 | 0.11 | 0.28 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 20 | 0.31 | 0.04 | 0.3 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 20 | 0.31 | 0.0 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 20 | 0.31 | 0.02 | 0.31 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 20 | 0.31 | 0.01 | 0.31 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 20 | 0.3 | 0.03 | 0.3 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 20 | 0.3 | 0.03 | 0.3 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 20 | 0.3 | 0.04 | 0.3 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 20 | 0.3 | 0.11 | 0.28 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 20 | 0.3 | 0.11 | 0.28 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 20 | 0.3 | 0.11 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 20 | 0.29 | 0.08 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 20 | 0.29 | 0.08 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 20 | 0.29 | 0.08 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 20 | 0.29 | 0.08 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 20 | 0.29 | 0.08 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 20 | 0.29 | 0.08 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 20 | 0.29 | 0.08 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 20 | 0.29 | 0.08 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 20 | 0.29 | 0.08 | 0.28 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 20 | 0.29 | 0.03 | 0.29 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 20 | 0.29 | 0.03 | 0.29 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 20 | 0.29 | 0.05 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 20 | 0.29 | 0.05 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 20 | 0.29 | 0.05 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 20 | 0.29 | 0.05 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 20 | 0.29 | 0.05 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 20 | 0.29 | 0.05 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 20 | 0.29 | 0.05 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 20 | 0.29 | 0.05 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 20 | 0.29 | 0.05 | 0.28 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.29 | 0.05 | 0.28 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 20 | 0.29 | 0.05 | 0.28 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 20 | 0.28 | 0.01 | 0.28 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 20 | 0.28 | 0.07 | 0.28 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 20 | 0.28 | 0.01 | 0.28 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 0.27 | 0.05 | 0.28 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 0.27 | 0.05 | 0.28 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 20 | 0.26 | 0.03 | 0.26 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 20 | 0.26 | 0.03 | 0.26 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 20 | 0.25 | 0.03 | 0.24 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 20 | 0.25 | 0.03 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 20 | 0.25 | 0.01 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 20 | 0.25 | 0.01 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 20 | 0.25 | 0.01 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 20 | 0.25 | 0.01 | 0.25 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 20 | 0.24 | 0.03 | 0.24 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 20 | 0.24 | 0.03 | 0.24 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 20 | 0.24 | 0.03 | 0.24 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 20 | 0.23 | 0.04 | 0.24 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 20 | 0.23 | 0.03 | 0.24 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 20 | 0.23 | 0.03 | 0.22 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 20 | 0.23 | 0.03 | 0.22 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 20 | 0.23 | 0.01 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 20 | 0.23 | 0.01 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 20 | 0.23 | 0.01 | 0.23 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 20 | 0.23 | 0.01 | 0.23 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 20 | 0.21 | 0.13 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 20 | 0.21 | 0.13 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 20 | 0.21 | 0.13 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 20 | 0.21 | 0.13 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 20 | 0.21 | 0.13 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 20 | 0.21 | 0.13 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 20 | 0.21 | 0.13 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 20 | 0.21 | 0.13 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 20 | 0.21 | 0.13 | 0.18 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 20 | 0.21 | 0.05 | 0.23 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 20 | 0.21 | 0.05 | 0.23 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 20 | 0.21 | 0.03 | 0.21 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 20 | 0.21 | 0.03 | 0.2 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 20 | 0.21 | 0.03 | 0.2 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 20 | 0.21 | 0.01 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 20 | 0.21 | 0.01 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 20 | 0.21 | 0.01 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 20 | 0.21 | 0.01 | 0.21 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 20 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 20 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 20 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 20 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 20 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 20 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 20 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 20 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 20 | 0.2 | 0.02 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 20 | 0.19 | 0.03 | 0.19 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 20 | 0.19 | 0.03 | 0.18 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 20 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 20 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 20 | 0.19 | 0.04 | 0.19 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 20 | 0.19 | 0.03 | 0.19 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 20 | 0.19 | 0.03 | 0.19 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 20 | 0.19 | 0.03 | 0.19 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 20 | 0.19 | 0.03 | 0.18 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 20 | 0.19 | 0.03 | 0.18 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 20 | 0.19 | 0.03 | 0.18 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 20 | 0.19 | 0.02 | 0.18 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 20 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 20 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 20 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 20 | 0.18 | 0.03 | 0.2 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 20 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 20 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 20 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 20 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 20 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 20 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 20 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 20 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 20 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 20 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 20 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 20 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 20 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 20 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 20 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 20 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 20 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 20 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 20 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 20 | 0.17 | 0.04 | 0.18 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 20 | 0.17 | 0.04 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 20 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 20 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 20 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 20 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 20 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 20 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 20 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 20 | 0.17 | 0.01 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 20 | 0.17 | 0.01 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 20 | 0.17 | 0.01 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 20 | 0.17 | 0.01 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 20 | 0.17 | 0.01 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 20 | 0.17 | 0.01 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 20 | 0.17 | 0.01 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 20 | 0.17 | 0.01 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 20 | 0.17 | 0.01 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 20 | 0.17 | 0.02 | 0.16 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 20 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 20 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 20 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 20 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 20 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 20 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 20 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 20 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 20 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 20 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 20 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 20 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 20 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 20 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 20 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 20 | 0.16 | 0.02 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 20 | 0.15 | 0.01 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 20 | 0.15 | 0.01 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 20 | 0.15 | 0.01 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 20 | 0.15 | 0.01 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 20 | 0.15 | 0.01 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 20 | 0.15 | 0.01 | 0.16 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 20 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 20 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 20 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 20 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 20 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 20 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 20 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 20 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 20 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 20 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 20 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 20 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 20 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 20 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 20 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 20 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 20 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 20 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 20 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 20 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 20 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 20 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 20 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 20 | 0.14 | 0.0 | 0.14 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 20 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 20 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 20 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 20 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 20 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 20 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 20 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 20 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 20 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 20 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 20 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 20 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 19 | 0.84 | 0.02 | 0.85 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 19 | 0.63 | 0.08 | 0.62 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 19 | 0.54 | 0.26 | 0.61 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 19 | 0.54 | 0.26 | 0.61 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 19 | 0.52 | 0.02 | 0.51 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 19 | 0.51 | 0.17 | 0.47 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 19 | 0.51 | 0.17 | 0.47 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 19 | 0.45 | 0.01 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 19 | 0.45 | 0.01 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 19 | 0.45 | 0.01 | 0.44 |
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 19 | 0.41 | 0.01 | 0.41 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 19 | 0.31 | 0.1 | 0.34 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 19 | 0.31 | 0.1 | 0.34 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 19 | 0.31 | 0.1 | 0.34 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 19 | 0.31 | 0.1 | 0.34 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 19 | 0.31 | 0.1 | 0.34 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 19 | 0.31 | 0.1 | 0.34 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 19 | 0.31 | 0.27 | 0.18 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 19 | 0.3 | 0.14 | 0.26 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 19 | 0.25 | 0.03 | 0.25 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 19 | 0.25 | 0.03 | 0.25 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 19 | 0.21 | 0.04 | 0.2 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 19 | 0.21 | 0.04 | 0.2 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 19 | 0.21 | 0.04 | 0.2 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 19 | 0.21 | 0.04 | 0.2 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 19 | 0.21 | 0.04 | 0.2 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 19 | 0.21 | 0.04 | 0.2 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 19 | 0.19 | 0.07 | 0.15 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 19 | 0.19 | 0.07 | 0.15 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 19 | 0.19 | 0.07 | 0.15 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 19 | 0.19 | 0.07 | 0.15 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 19 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 19 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 19 | 0.17 | 0.03 | 0.18 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 19 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 19 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 19 | 0.16 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 19 | 0.16 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 19 | 0.16 | 0.02 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 19 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 19 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 19 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 19 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 19 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 19 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 19 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 19 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 19 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,331) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:104:ASN:HB3 | 18 | 0.72 | 0.15 | 0.71 |
| (1,2113) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:82:VAL:HB | 18 | 0.59 | 0.03 | 0.6 |
| (1,1951) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:104:ASN:HB3 | 18 | 0.45 | 0.03 | 0.44 |
| (1,1532) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 18 | 0.43 | 0.21 | 0.46 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:72:ASN:HD21 | 18 | 0.34 | 0.34 | 0.21 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:72:ASN:HD21 | 18 | 0.34 | 0.34 | 0.21 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:72:ASN:HD21 | 18 | 0.34 | 0.34 | 0.21 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HA | 18 | 0.22 | 0.05 | 0.24 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HA | 18 | 0.22 | 0.05 | 0.24 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HA | 18 | 0.22 | 0.05 | 0.24 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 18 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 18 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 18 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 18 | 0.18 | 0.08 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD11 | 18 | 0.18 | 0.08 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD13 | 18 | 0.18 | 0.08 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD12 | 18 | 0.18 | 0.08 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 18 | 0.18 | 0.08 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD13 | 18 | 0.18 | 0.08 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD12 | 18 | 0.18 | 0.08 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD11 | 18 | 0.18 | 0.08 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD13 | 18 | 0.18 | 0.08 | 0.17 |
| (1,342) | 1:A:7:SER:HB3 | 1:A:7:SER:HA | 18 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 18 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 18 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 18 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:119:LYS:H | 18 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:119:LYS:H | 18 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:119:LYS:H | 18 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,552) | 1:A:137:ASP:HA | 1:A:138:ILE:HA | 18 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD22 | 18 | 0.15 | 0.05 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD21 | 18 | 0.15 | 0.05 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD23 | 18 | 0.15 | 0.05 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 18 | 0.15 | 0.05 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 18 | 0.15 | 0.05 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 18 | 0.15 | 0.05 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 18 | 0.15 | 0.05 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 18 | 0.15 | 0.05 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 18 | 0.15 | 0.05 | 0.15 |
| (1,1019) | 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:105:PHE:H | 18 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:LYS:HA | 18 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:47:LYS:HA | 18 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:47:LYS:HA | 18 | 0.15 | 0.02 | 0.14 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 18 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 18 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 18 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 18 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 18 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 18 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,597) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:83:VAL:H | 18 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1746) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:109:VAL:HB | 18 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1598) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HG3 | 17 | 0.99 | 0.17 | 1.03 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 17 | 0.23 | 0.05 | 0.23 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 17 | 0.23 | 0.05 | 0.23 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 17 | 0.23 | 0.05 | 0.23 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:92:CYS:HB3 | 17 | 0.19 | 0.07 | 0.17 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:92:CYS:HB3 | 17 | 0.19 | 0.07 | 0.17 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:92:CYS:HB3 | 17 | 0.19 | 0.07 | 0.17 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HB2 | 17 | 0.19 | 0.07 | 0.17 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HB2 | 17 | 0.19 | 0.07 | 0.17 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HB2 | 17 | 0.19 | 0.07 | 0.17 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG21 | 17 | 0.19 | 0.05 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG22 | 17 | 0.19 | 0.05 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG23 | 17 | 0.19 | 0.05 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG21 | 17 | 0.19 | 0.05 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG22 | 17 | 0.19 | 0.05 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG23 | 17 | 0.19 | 0.05 | 0.2 |
| (1,836) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 17 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:4:LYS:HA | 17 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:4:LYS:HA | 17 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HA | 17 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HA | 17 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HA | 17 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:101:ILE:HB | 17 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:56:ARG:HB3 | 17 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:101:ILE:HB | 17 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,1542) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 17 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,788) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:49:GLN:HE21 | 16 | 1.47 | 0.26 | 1.44 |
| (1,785) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HG2 | 16 | 0.84 | 0.14 | 0.86 |
| (1,141) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:66:PHE:HD1 | 16 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,63) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:109:VAL:HA | 16 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:36:ILE:H | 16 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:36:ILE:H | 16 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:36:ILE:H | 16 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:85:PHE:HE1 | 16 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:85:PHE:HE1 | 16 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:85:PHE:HE1 | 16 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG22 | 16 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG21 | 16 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG23 | 16 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1850) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 16 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,104) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HA | 16 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:113:ASN:HA | 16 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:117:ASP:HA | 16 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD22 | 15 | 0.29 | 0.4 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD21 | 15 | 0.29 | 0.4 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD23 | 15 | 0.29 | 0.4 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD22 | 15 | 0.29 | 0.4 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD21 | 15 | 0.29 | 0.4 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD23 | 15 | 0.29 | 0.4 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD22 | 15 | 0.29 | 0.4 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD21 | 15 | 0.29 | 0.4 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD23 | 15 | 0.29 | 0.4 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.29 | 0.4 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.29 | 0.4 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.29 | 0.4 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.29 | 0.4 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.29 | 0.4 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.29 | 0.4 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.29 | 0.4 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.29 | 0.4 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.29 | 0.4 | 0.18 |
| (1,1864) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HG2 | 15 | 0.28 | 0.07 | 0.29 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE2 | 1:A:138:ILE:HB | 15 | 0.2 | 0.04 | 0.19 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE1 | 1:A:138:ILE:HB | 15 | 0.2 | 0.04 | 0.19 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HE1 | 15 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HE1 | 15 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 15 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 15 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 15 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG21 | 15 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG22 | 15 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG23 | 15 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG21 | 15 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG22 | 15 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG23 | 15 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG21 | 15 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG22 | 15 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG23 | 15 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE2 | 15 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE1 | 15 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE3 | 15 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE2 | 15 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE1 | 15 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE3 | 15 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE2 | 15 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE1 | 15 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE3 | 15 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD12 | 1:A:144:ILE:HA | 15 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD11 | 1:A:144:ILE:HA | 15 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD13 | 1:A:144:ILE:HA | 15 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,520) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HG2 | 14 | 0.39 | 0.23 | 0.33 |
| (1,2078) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:85:PHE:H | 14 | 0.27 | 0.03 | 0.27 |
| (1,713) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 14 | 0.25 | 0.03 | 0.25 |
| (1,591) | 1:A:141:ALA:HA | 1:A:142:GLN:HB2 | 14 | 0.24 | 0.3 | 0.13 |
| (1,949) | 1:A:87:ILE:HG12 | 1:A:73:MET:HA | 14 | 0.22 | 0.09 | 0.19 |
| (1,475) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:35:GLU:HA | 14 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 14 | 0.14 | 0.05 | 0.13 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 14 | 0.14 | 0.05 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 14 | 0.14 | 0.05 | 0.13 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD12 | 14 | 0.14 | 0.05 | 0.13 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD11 | 14 | 0.14 | 0.05 | 0.13 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD13 | 14 | 0.14 | 0.05 | 0.13 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB3 | 14 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB3 | 14 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB3 | 14 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB2 | 14 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB2 | 14 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB2 | 14 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1404) | 1:A:12:ALA:H | 1:A:11:SER:HA | 14 | 0.13 | 0.01 | 0.14 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG21 | 14 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG22 | 14 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG23 | 14 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:74:ARG:H | 14 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:74:ARG:H | 14 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:74:ARG:H | 14 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2223) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:81:LYS:HG3 | 13 | 0.25 | 0.26 | 0.14 |
| (1,527) | 1:A:145:GLU:HA | 1:A:146:TRP:HB3 | 13 | 0.21 | 0.12 | 0.18 |
| (1,1643) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG3 | 13 | 0.17 | 0.03 | 0.17 |
| (1,454) | 1:A:57:GLU:HA | 1:A:57:GLU:HB2 | 13 | 0.15 | 0.04 | 0.13 |
| (1,740) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:19:ASN:HB3 | 13 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:52:PHE:HA | 13 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:53:ASP:HA | 13 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,798) | 1:A:78:GLU:HG2 | 1:A:79:ASN:HB3 | 12 | 1.67 | 0.72 | 1.52 |
| (1,795) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:124:GLU:HG3 | 12 | 0.59 | 0.16 | 0.6 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG12 | 12 | 0.46 | 0.71 | 0.17 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG11 | 12 | 0.46 | 0.71 | 0.17 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG13 | 12 | 0.46 | 0.71 | 0.17 |
| (1,678) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 12 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 12 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 12 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HD2 | 12 | 0.15 | 0.04 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HD2 | 12 | 0.15 | 0.04 | 0.13 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HD2 | 12 | 0.15 | 0.04 | 0.13 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:123:PHE:H | 12 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:123:PHE:H | 12 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:123:PHE:H | 12 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,116) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HB3 | 12 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD12 | 12 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD11 | 12 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD13 | 12 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 12 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 12 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 12 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB2 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB3 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG22 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG21 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG23 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 1.27 | 0.35 | 1.45 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 1.27 | 0.35 | 1.45 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 1.27 | 0.35 | 1.45 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG22 | 11 | 0.37 | 0.55 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG21 | 11 | 0.37 | 0.55 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG23 | 11 | 0.37 | 0.55 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG22 | 11 | 0.37 | 0.55 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG21 | 11 | 0.37 | 0.55 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG23 | 11 | 0.37 | 0.55 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG22 | 11 | 0.37 | 0.55 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG21 | 11 | 0.37 | 0.55 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG23 | 11 | 0.37 | 0.55 | 0.12 |
| (1,387) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:65:ASP:HB3 | 11 | 0.31 | 0.22 | 0.14 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 11 | 0.24 | 0.09 | 0.22 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 11 | 0.24 | 0.09 | 0.22 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 11 | 0.24 | 0.09 | 0.22 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB2 | 11 | 0.24 | 0.09 | 0.22 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB1 | 11 | 0.24 | 0.09 | 0.22 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB3 | 11 | 0.24 | 0.09 | 0.22 |
| (1,570) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:137:ASP:H | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1420) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:144:ILE:HB | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG22 | 11 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG21 | 11 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG23 | 11 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD12 | 11 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD11 | 11 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD13 | 11 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD12 | 11 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD11 | 11 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD13 | 11 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD12 | 11 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD11 | 11 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD13 | 11 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2273) | 1:A:115:VAL:H | 1:A:116:THR:HB | 11 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,415) | 1:A:97:SER:HA | 1:A:96:PRO:HB2 | 11 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,383) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:HA | 11 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,535) | 1:A:39:SER:HA | 1:A:38:LYS:HG2 | 10 | 1.3 | 0.44 | 1.46 |
| (1,1394) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:147:HIS:HB2 | 10 | 0.94 | 0.15 | 1.02 |
| (1,355) | 1:A:110:SER:HB3 | 1:A:111:ILE:HG12 | 10 | 0.61 | 0.48 | 0.6 |
| (1,354) | 1:A:11:SER:HB3 | 1:A:11:SER:HA | 10 | 0.52 | 0.26 | 0.69 |
| (1,1722) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:49:GLN:HE21 | 10 | 0.44 | 0.2 | 0.48 |
| (1,1922) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 10 | 0.36 | 0.34 | 0.26 |
| (1,808) | 1:A:145:GLU:HG3 | 1:A:145:GLU:HA | 10 | 0.27 | 0.13 | 0.24 |
| (1,1689) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:52:PHE:HB2 | 10 | 0.25 | 0.05 | 0.24 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:123:PHE:HD2 | 10 | 0.23 | 0.23 | 0.15 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:123:PHE:HD2 | 10 | 0.23 | 0.23 | 0.15 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:123:PHE:HD2 | 10 | 0.23 | 0.23 | 0.15 |
| (1,1642) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 10 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:121:ARG:HB3 | 10 | 0.21 | 0.04 | 0.22 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:121:ARG:HB3 | 10 | 0.21 | 0.04 | 0.22 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:121:ARG:HB3 | 10 | 0.21 | 0.04 | 0.22 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:36:ILE:HB | 10 | 0.21 | 0.04 | 0.22 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:36:ILE:HB | 10 | 0.21 | 0.04 | 0.22 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:36:ILE:HB | 10 | 0.21 | 0.04 | 0.22 |
| (1,933) | 1:A:121:ARG:HB2 | 1:A:121:ARG:HD2 | 10 | 0.2 | 0.07 | 0.18 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG3 | 10 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG2 | 10 | 0.2 | 0.05 | 0.22 |
| (1,216) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HG2 | 10 | 0.19 | 0.08 | 0.18 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD22 | 10 | 0.17 | 0.05 | 0.16 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD21 | 10 | 0.17 | 0.05 | 0.16 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD23 | 10 | 0.17 | 0.05 | 0.16 |
| (1,952) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HG12 | 10 | 0.17 | 0.05 | 0.16 |
| (1,2043) | 1:A:90:THR:H | 1:A:89:ASN:HB3 | 10 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:H | 10 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:H | 10 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:H | 10 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:32:LEU:H | 10 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:32:LEU:H | 10 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:32:LEU:H | 10 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,813) | 1:A:88:GLU:HG2 | 1:A:73:MET:HA | 10 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD22 | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD21 | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD23 | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 9 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 9 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 9 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,554) | 1:A:147:HIS:HA | 1:A:147:HIS:HD2 | 9 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD22 | 9 | 0.15 | 0.04 | 0.13 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD21 | 9 | 0.15 | 0.04 | 0.13 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD23 | 9 | 0.15 | 0.04 | 0.13 |
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG2 | 9 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG3 | 9 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:92:CYS:HB2 | 9 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:91:ASN:HB2 | 9 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (1,438) | 1:A:47:LYS:HA | 1:A:44:ARG:HA | 9 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG3 | 9 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 9 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HA | 9 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:18:THR:HB | 9 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1055) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 9 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD12 | 1:A:123:PHE:HE2 | 9 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD11 | 1:A:123:PHE:HE2 | 9 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD13 | 1:A:123:PHE:HE2 | 9 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2225) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:79:ASN:HB3 | 8 | 1.13 | 0.08 | 1.1 |
| (1,715) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:23:ILE:HB | 8 | 0.94 | 0.48 | 1.15 |
| (1,1904) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HG2 | 8 | 0.55 | 0.17 | 0.6 |
| (1,2248) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:94:ASN:HD22 | 8 | 0.41 | 0.07 | 0.41 |
| (1,1797) | 1:A:81:LYS:H | 1:A:79:ASN:HB3 | 8 | 0.3 | 0.08 | 0.32 |
| (1,352) | 1:A:11:SER:HB2 | 1:A:12:ALA:H | 8 | 0.26 | 0.05 | 0.26 |
| (1,1556) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 8 | 0.2 | 0.04 | 0.19 |
| (1,2005) | 1:A:127:SER:H | 1:A:126:ALA:HA | 8 | 0.19 | 0.08 | 0.17 |
| (1,370) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:98:ILE:H | 8 | 0.16 | 0.06 | 0.12 |
| (1,1740) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HB3 | 8 | 0.16 | 0.06 | 0.12 |
| (1,114) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HA | 8 | 0.13 | 0.01 | 0.14 |
| (1,1809) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:35:GLU:HG3 | 8 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |
| (1,564) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HG | 8 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 1.05 | 0.14 | 1.08 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 1.05 | 0.14 | 1.08 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 1.05 | 0.14 | 1.08 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,380) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:H | 7 | 0.63 | 0.01 | 0.63 |
| (1,1853) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:136:ASN:HB2 | 7 | 0.43 | 0.26 | 0.51 |
| (1,730) | 1:A:136:ASN:HD22 | 1:A:136:ASN:HB2 | 7 | 0.4 | 0.11 | 0.44 |
| (1,436) | 1:A:45:LYS:HA | 1:A:45:LYS:HG3 | 7 | 0.39 | 0.01 | 0.39 |
| (2,209) | 1:A:79:ASN:HA | 1:A:79:ASN:HB2 | 7 | 0.33 | 0.08 | 0.37 |
| (2,209) | 1:A:147:HIS:HA | 1:A:147:HIS:HB2 | 7 | 0.33 | 0.08 | 0.37 |
| (2,244) | 1:A:95:ASN:HB3 | 1:A:93:LEU:HA | 7 | 0.26 | 0.1 | 0.26 |
| (2,244) | 1:A:95:ASN:HB3 | 1:A:97:SER:HB3 | 7 | 0.26 | 0.1 | 0.26 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD12 | 7 | 0.22 | 0.21 | 0.12 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD11 | 7 | 0.22 | 0.21 | 0.12 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD13 | 7 | 0.22 | 0.21 | 0.12 |
| (1,2179) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HG2 | 7 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (1,2059) | 1:A:136:ASN:HD21 | 1:A:137:ASP:H | 7 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (2,124) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HB | 7 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (2,124) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HB | 7 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD12 | 1:A:32:LEU:HA | 7 | 0.13 | 0.03 | 0.11 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD11 | 1:A:32:LEU:HA | 7 | 0.13 | 0.03 | 0.11 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD13 | 1:A:32:LEU:HA | 7 | 0.13 | 0.03 | 0.11 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:26:CYS:H | 7 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:26:CYS:H | 7 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:26:CYS:H | 7 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:33:VAL:H | 7 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:33:VAL:H | 7 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:33:VAL:H | 7 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG22 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG21 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG23 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2138) | 1:A:28:THR:H | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.73 | 0.09 | 0.76 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.73 | 0.09 | 0.76 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.73 | 0.09 | 0.76 |
| (1,1074) | 1:A:76:LYS:HG3 | 1:A:77:ILE:H | 6 | 0.72 | 0.39 | 0.94 |
| (1,2006) | 1:A:127:SER:H | 1:A:127:SER:HB3 | 6 | 0.68 | 0.24 | 0.76 |
| (1,1729) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 6 | 0.64 | 0.07 | 0.63 |
| (1,2158) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 6 | 0.6 | 0.42 | 0.57 |
| (1,545) | 1:A:81:LYS:HA | 1:A:81:LYS:HG3 | 6 | 0.59 | 0.34 | 0.76 |
| (1,235) | 1:A:139:PHE:HZ | 1:A:138:ILE:HG12 | 6 | 0.52 | 0.31 | 0.6 |
| (1,276) | 1:A:100:THR:HB | 1:A:101:ILE:HG12 | 6 | 0.5 | 0.04 | 0.52 |
| (1,926) | 1:A:140:GLU:H | 1:A:140:GLU:HB2 | 6 | 0.44 | 0.17 | 0.53 |
| (2,219) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:16:GLN:HG2 | 6 | 0.42 | 0.19 | 0.48 |
| (2,219) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:16:GLN:HG3 | 6 | 0.42 | 0.19 | 0.48 |
| (1,2012) | 1:A:24:ASN:HD22 | 1:A:24:ASN:HB3 | 6 | 0.4 | 0.1 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,2050) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 6 | 0.32 | 0.09 | 0.34 |
| (1,2107) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:49:GLN:HG2 | 6 | 0.29 | 0.01 | 0.29 |
| (1,587) | 1:A:24:ASN:HA | 1:A:24:ASN:HB2 | 6 | 0.23 | 0.03 | 0.22 |
| (1,936) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:124:GLU:H | 6 | 0.2 | 0.06 | 0.18 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HG3 | 6 | 0.17 | 0.05 | 0.16 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 6 | 0.17 | 0.05 | 0.16 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 6 | 0.17 | 0.05 | 0.16 |
| (1,1418) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:146:TRP:H | 6 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |
| (1,1001) | 1:A:20:LYS:HD3 | 1:A:20:LYS:HA | 6 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (1,656) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:53:ASP:H | 6 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,252) | 1:A:19:ASN:HB3 | 1:A:20:LYS:HB2 | 6 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,252) | 1:A:19:ASN:HB3 | 1:A:20:LYS:HB3 | 6 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,1685) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:53:ASP:HB2 | 6 | 0.13 | 0.02 | 0.14 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HD2 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE2 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE1 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE3 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE2 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE1 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE3 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE2 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE1 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE3 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG22 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG21 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG23 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG22 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG21 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG23 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,51) | 1:A:52:PHE:HD2 | 1:A:66:PHE:HD2 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG22 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG21 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG23 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG22 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG21 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG23 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG22 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG21 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG23 | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,74) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:113:ASN:HA | 6 | 0.12 | 0.02 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD12 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD11 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD13 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD22 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD21 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD23 | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,731) | 1:A:136:ASN:HB2 | 1:A:136:ASN:HA | 6 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,125) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:56:ARG:HA | 6 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,125) | 1:A:66:PHE:HD2 | 1:A:56:ARG:HA | 6 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG22 | 6 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG21 | 6 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG23 | 6 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,83) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HD12 | 5 | 1.86 | 0.56 | 1.83 |
| (1,83) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HD11 | 5 | 1.86 | 0.56 | 1.83 |
| (1,83) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HD13 | 5 | 1.86 | 0.56 | 1.83 |
| (1,338) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:51:ALA:HB2 | 5 | 1.14 | 0.09 | 1.18 |
| (1,338) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:51:ALA:HB1 | 5 | 1.14 | 0.09 | 1.18 |
| (1,338) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:51:ALA:HB3 | 5 | 1.14 | 0.09 | 1.18 |
| (1,2142) | 1:A:106:ASN:H | 1:A:106:ASN:HD22 | 5 | 1.08 | 0.47 | 1.31 |
| (1,999) | 1:A:20:LYS:HD2 | 1:A:20:LYS:H | 5 | 1.01 | 0.04 | 1.0 |
| (1,1857) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 5 | 0.62 | 0.29 | 0.83 |
| (2,459) | 1:A:142:GLN:H | 1:A:142:GLN:HG2 | 5 | 0.44 | 0.03 | 0.46 |
| (2,459) | 1:A:142:GLN:H | 1:A:142:GLN:HG3 | 5 | 0.44 | 0.03 | 0.46 |
| (1,356) | 1:A:110:SER:H | 1:A:110:SER:HB3 | 5 | 0.41 | 0.0 | 0.41 |
| (1,882) | 1:A:46:ILE:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 5 | 0.4 | 0.13 | 0.48 |
| (1,336) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:50:SER:HB3 | 5 | 0.34 | 0.07 | 0.35 |
| (1,1276) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:72:ASN:HB3 | 5 | 0.32 | 0.05 | 0.3 |
| (1,1276) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:72:ASN:HB3 | 5 | 0.32 | 0.05 | 0.3 |
| (1,1276) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:72:ASN:HB3 | 5 | 0.32 | 0.05 | 0.3 |
| (1,1629) | 1:A:50:SER:H | 1:A:50:SER:HB2 | 5 | 0.31 | 0.05 | 0.33 |
| (2,164) | 1:A:131:SER:HB3 | 1:A:131:SER:H | 5 | 0.29 | 0.21 | 0.19 |
| (2,164) | 1:A:127:SER:H | 1:A:127:SER:HB3 | 5 | 0.29 | 0.21 | 0.19 |
| (1,530) | 1:A:142:GLN:HA | 1:A:142:GLN:HB3 | 5 | 0.25 | 0.0 | 0.25 |
| (2,548) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:20:LYS:HD3 | 5 | 0.19 | 0.02 | 0.19 |
| (2,548) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:56:ARG:HB3 | 5 | 0.19 | 0.02 | 0.19 |
| (2,548) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HB | 5 | 0.19 | 0.02 | 0.19 |
| (2,238) | 1:A:85:PHE:HB3 | 1:A:76:LYS:H | 5 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (2,238) | 1:A:85:PHE:HB3 | 1:A:86:ASN:H | 5 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (2,238) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:76:LYS:H | 5 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (1,1855) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HD12 | 5 | 0.17 | 0.05 | 0.14 |
| (1,1855) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HD11 | 5 | 0.17 | 0.05 | 0.14 |
| (1,1855) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HD13 | 5 | 0.17 | 0.05 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,728) | 1:A:136:ASN:HB3 | 1:A:136:ASN:HA | 5 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,2092) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG3 | 5 | 0.14 | 0.0 | 0.14 |
| (2,85) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HG2 | 5 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:56:ARG:HG2 | 5 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (1,1396) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:148:GLU:HB3 | 5 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1767) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:93:LEU:HB2 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,20) | 1:A:75:PHE:HB2 | 1:A:75:PHE:HD2 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,57) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:5:TYR:HE1 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,57) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:5:TYR:HE1 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1700) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:67:ILE:HB | 5 | 0.12 | 0.02 | 0.11 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,134) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:108:PHE:HB3 | 5 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1028) | 1:A:121:ARG:H | 1:A:121:ARG:HG2 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2040) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB2 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,369) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:110:SER:HB2 | 5 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,250) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:102:TYR:HD2 | 5 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,539) | 1:A:113:ASN:HA | 1:A:81:LYS:HG2 | 4 | 0.62 | 0.27 | 0.64 |
| (1,762) | 1:A:106:ASN:HB3 | 1:A:85:PHE:HE1 | 4 | 0.59 | 0.16 | 0.65 |
| (1,1528) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:143:LYS:HB2 | 4 | 0.43 | 0.18 | 0.5 |
| (1,339) | 1:A:127:SER:HB2 | 1:A:127:SER:HA | 4 | 0.35 | 0.01 | 0.36 |
| (1,802) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:57:GLU:HA | 4 | 0.34 | 0.02 | 0.34 |
| (2,259) | 1:A:140:GLU:HG3 | 1:A:140:GLU:HA | 4 | 0.31 | 0.02 | 0.32 |
| (2,259) | 1:A:140:GLU:HG2 | 1:A:140:GLU:HA | 4 | 0.31 | 0.02 | 0.32 |
| (1,632) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:84:ASN:HB3 | 4 | 0.25 | 0.01 | 0.24 |
| (1,1854) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HG | 4 | 0.21 | 0.05 | 0.2 |
| (1,1852) | 1:A:135:LEU:H | 1:A:136:ASN:H | 4 | 0.2 | 0.04 | 0.22 |
| (1,1455) | 1:A:141:ALA:H | 1:A:140:GLU:HB3 | 4 | 0.18 | 0.08 | 0.16 |
| (1,232) | 1:A:123:PHE:HD1 | 1:A:47:LYS:HG2 | 4 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1531) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 4 | 0.18 | 0.08 | 0.14 |
| (2,294) | 1:A:25:GLU:HB3 | 1:A:18:THR:HG21 | 4 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,294) | 1:A:25:GLU:HB3 | 1:A:18:THR:HG22 | 4 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,294) | 1:A:25:GLU:HB3 | 1:A:18:THR:HG23 | 4 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,294) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:45:LYS:HG3 | 4 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,170) | 1:A:58:CYS:HA | 1:A:20:LYS:HB2 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,170) | 1:A:58:CYS:HA | 1:A:20:LYS:HB3 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1924) | 1:A:85:PHE:H | 1:A:84:ASN:HB3 | 4 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,52) | 1:A:52:PHE:HD2 | 1:A:53:ASP:HB2 | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:33:VAL:HB | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:33:VAL:HB | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:33:VAL:HB | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:118:VAL:HB | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:118:VAL:HB | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:118:VAL:HB | 4 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 4 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 4 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 4 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 4 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 4 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 4 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:32:LEU:HD12 | 4 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:32:LEU:HD11 | 4 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:32:LEU:HD13 | 4 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (1,1554) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:123:PHE:HB2 | 4 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1131) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:28:THR:HG21 | 4 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1131) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:28:THR:HG22 | 4 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1131) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:28:THR:HG23 | 4 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1363) | 1:A:120:LYS:H | 1:A:120:LYS:HG2 | 4 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,260) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:87:ILE:HA | 4 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (2,260) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HA | 4 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:135:LEU:HD22 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:135:LEU:HD21 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:135:LEU:HD23 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:135:LEU:HD22 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:135:LEU:HD21 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:135:LEU:HD23 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1900) | 1:A:70:VAL:H | 1:A:70:VAL:HG22 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1900) | 1:A:70:VAL:H | 1:A:70:VAL:HG21 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1900) | 1:A:70:VAL:H | 1:A:70:VAL:HG23 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,333) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:101:ILE:HD12 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,333) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:101:ILE:HD11 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,333) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:101:ILE:HD13 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1562) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:9:VAL:HA | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,198) | 1:A:123:PHE:HA | 1:A:123:PHE:HD1 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,198) | 1:A:123:PHE:HA | 1:A:123:PHE:HD2 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,835) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:16:GLN:HG2 | 3 | 1.31 | 0.06 | 1.34 |
| (1,1866) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HB2 | 3 | 0.99 | 0.0 | 0.99 |
| (2,268) | 1:A:16:GLN:HG2 | 1:A:15:LYS:HG3 | 3 | 0.73 | 0.11 | 0.69 |
| (2,268) | 1:A:16:GLN:HG2 | 1:A:15:LYS:HG2 | 3 | 0.73 | 0.11 | 0.69 |
| (1,1815) | 1:A:81:LYS:H | 1:A:81:LYS:HG3 | 3 | 0.71 | 0.1 | 0.7 |
| (1,1242) | 1:A:111:ILE:HD12 | 1:A:16:GLN:HG3 | 3 | 0.66 | 0.09 | 0.63 |
| (1,1242) | 1:A:111:ILE:HD11 | 1:A:16:GLN:HG3 | 3 | 0.66 | 0.09 | 0.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1242) | 1:A:111:ILE:HD13 | 1:A:16:GLN:HG3 | 3 | 0.66 | 0.09 | 0.63 |
| (1,1599) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HB3 | 3 | 0.64 | 0.06 | 0.64 |
| (1,1395) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:148:GLU:HB2 | 3 | 0.61 | 0.05 | 0.63 |
| (1,793) | 1:A:25:GLU:HG2 | 1:A:25:GLU:HA | 3 | 0.49 | 0.02 | 0.5 |
| (1,1908) | 1:A:70:VAL:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 3 | 0.49 | 0.34 | 0.27 |
| (2,179) | 1:A:45:LYS:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 3 | 0.4 | 0.07 | 0.36 |
| (2,179) | 1:A:45:LYS:HA | 1:A:45:LYS:HG2 | 3 | 0.4 | 0.07 | 0.36 |
| (1,629) | 1:A:135:LEU:HB2 | 1:A:135:LEU:HD12 | 3 | 0.39 | 0.11 | 0.46 |
| (1,629) | 1:A:135:LEU:HB2 | 1:A:135:LEU:HD11 | 3 | 0.39 | 0.11 | 0.46 |
| (1,629) | 1:A:135:LEU:HB2 | 1:A:135:LEU:HD13 | 3 | 0.39 | 0.11 | 0.46 |
| (1,1955) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:72:ASN:HB3 | 3 | 0.36 | 0.07 | 0.34 |
| (1,1453) | 1:A:146:TRP:H | 1:A:145:GLU:HB3 | 3 | 0.35 | 0.14 | 0.4 |
| (1,319) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HB2 | 3 | 0.31 | 0.09 | 0.27 |
| (2,296) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:120:LYS:HG2 | 3 | 0.27 | 0.21 | 0.14 |
| (2,296) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:126:ALA:HB2 | 3 | 0.27 | 0.21 | 0.14 |
| (2,296) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:126:ALA:HB1 | 3 | 0.27 | 0.21 | 0.14 |
| (2,296) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:126:ALA:HB3 | 3 | 0.27 | 0.21 | 0.14 |
| (2,190) | 1:A:148:GLU:HA | 1:A:148:GLU:HG2 | 3 | 0.26 | 0.02 | 0.27 |
| (2,190) | 1:A:148:GLU:HA | 1:A:148:GLU:HG3 | 3 | 0.26 | 0.02 | 0.27 |
| (1,2014) | 1:A:104:ASN:HD22 | 1:A:104:ASN:HB3 | 3 | 0.25 | 0.01 | 0.25 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HG22 | 3 | 0.21 | 0.06 | 0.25 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HG21 | 3 | 0.21 | 0.06 | 0.25 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HG23 | 3 | 0.21 | 0.06 | 0.25 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HG22 | 3 | 0.21 | 0.06 | 0.25 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HG21 | 3 | 0.21 | 0.06 | 0.25 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HG23 | 3 | 0.21 | 0.06 | 0.25 |
| (2,175) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:98:ILE:HD12 | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (2,175) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:98:ILE:HD11 | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (2,175) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:98:ILE:HD13 | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (2,175) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG12 | 3 | 0.2 | 0.03 | 0.19 |
| (1,935) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:124:GLU:HB2 | 3 | 0.19 | 0.05 | 0.21 |
| (1,1661) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 3 | 0.17 | 0.05 | 0.14 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 3 | 0.15 | 0.05 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 3 | 0.15 | 0.05 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 3 | 0.15 | 0.05 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 3 | 0.15 | 0.05 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 3 | 0.15 | 0.05 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 3 | 0.15 | 0.05 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 3 | 0.15 | 0.05 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 3 | 0.15 | 0.05 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 3 | 0.15 | 0.05 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 3 | 0.15 | 0.05 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 3 | 0.15 | 0.05 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 3 | 0.15 | 0.05 | 0.12 |
| (2,535) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HA | 3 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,535) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HB | 3 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,1578) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:138:ILE:HG22 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1578) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:138:ILE:HG21 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1578) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:138:ILE:HG23 | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,461) | 1:A:128:GLY:H | 1:A:127:SER:HA | 3 | 0.14 | 0.04 | 0.12 |
| (1,668) | 1:A:137:ASP:HB2 | 1:A:138:ILE:H | 3 | 0.13 | 0.01 | 0.14 |
| (2,211) | 1:A:94:ASN:HA | 1:A:93:LEU:HA | 3 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,211) | 1:A:94:ASN:HA | 1:A:99:GLU:HA | 3 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:100:THR:HB | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:100:THR:HB | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:100:THR:HB | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:65:ASP:HA | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:65:ASP:HA | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:65:ASP:HA | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1279) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HD12 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1279) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HD11 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1279) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HD13 | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1555) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:124:GLU:HB3 | 3 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,496) | 1:A:6:PHE:HA | 1:A:9:VAL:HG22 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,496) | 1:A:6:PHE:HA | 1:A:9:VAL:HG21 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,496) | 1:A:6:PHE:HA | 1:A:9:VAL:HG23 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,505) | 1:A:124:GLU:HA | 1:A:124:GLU:H | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,201) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HB2 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,201) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HB3 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,797) | 1:A:78:GLU:HG2 | 1:A:78:GLU:HA | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1450) | 1:A:146:TRP:H | 1:A:147:HIS:H | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,14) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:3:GLY:HA3 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,14) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:3:GLY:HA2 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HG22 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HG21 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HG23 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:118:VAL:HG22 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:118:VAL:HG21 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:118:VAL:HG23 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:46:ILE:HD12 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:46:ILE:HD11 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:46:ILE:HD13 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:46:ILE:HD12 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:46:ILE:HD11 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:46:ILE:HD13 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:46:ILE:HD12 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:46:ILE:HD11 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:46:ILE:HD13 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,53) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:52:PHE:HB3 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,53) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HA | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,111) | 1:A:85:PHE:HD1 | 1:A:82:VAL:HG22 | 2 | 2.12 | 0.02 | 2.12 |
| (1,111) | 1:A:85:PHE:HD1 | 1:A:82:VAL:HG21 | 2 | 2.12 | 0.02 | 2.12 |
| (1,111) | 1:A:85:PHE:HD1 | 1:A:82:VAL:HG23 | 2 | 2.12 | 0.02 | 2.12 |
| (1,2) | 1:A:112:PHE:HE2 | 1:A:82:VAL:HG12 | 2 | 1.88 | 0.05 | 1.88 |
| (1,2) | 1:A:112:PHE:HE2 | 1:A:82:VAL:HG11 | 2 | 1.88 | 0.05 | 1.88 |
| (1,2) | 1:A:112:PHE:HE2 | 1:A:82:VAL:HG13 | 2 | 1.88 | 0.05 | 1.88 |
| (1,1937) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:82:VAL:HG22 | 2 | 1.48 | 0.03 | 1.48 |
| (1,1937) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:82:VAL:HG21 | 2 | 1.48 | 0.03 | 1.48 |
| (1,1937) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:82:VAL:HG23 | 2 | 1.48 | 0.03 | 1.48 |
| (1,839) | 1:A:76:LYS:HB3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 2 | 1.1 | 0.12 | 1.1 |
| (1,839) | 1:A:76:LYS:HB3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 2 | 1.1 | 0.12 | 1.1 |
| (1,839) | 1:A:76:LYS:HB3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 2 | 1.1 | 0.12 | 1.1 |
| (1,72) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:82:VAL:HG12 | 2 | 1.09 | 0.06 | 1.09 |
| (1,72) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:82:VAL:HG11 | 2 | 1.09 | 0.06 | 1.09 |
| (1,72) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:82:VAL:HG13 | 2 | 1.09 | 0.06 | 1.09 |
| (1,683) | 1:A:34:ASP:HB3 | 1:A:35:GLU:HG2 | 2 | 0.99 | 0.15 | 0.99 |
| (1,532) | 1:A:135:LEU:HA | 1:A:135:LEU:HD12 | 2 | 0.99 | 0.14 | 0.99 |
| (1,532) | 1:A:135:LEU:HA | 1:A:135:LEU:HD11 | 2 | 0.99 | 0.14 | 0.99 |
| (1,532) | 1:A:135:LEU:HA | 1:A:135:LEU:HD13 | 2 | 0.99 | 0.14 | 0.99 |
| (1,211) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:82:VAL:HG22 | 2 | 0.92 | 0.1 | 0.92 |
| (1,211) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:82:VAL:HG21 | 2 | 0.92 | 0.1 | 0.92 |
| (1,211) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:82:VAL:HG23 | 2 | 0.92 | 0.1 | 0.92 |
| (1,1991) | 1:A:106:ASN:H | 1:A:106:ASN:HB3 | 2 | 0.71 | 0.0 | 0.71 |
| (2,415) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:82:VAL:HG12 | 2 | 0.67 | 0.05 | 0.67 |
| (2,415) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:82:VAL:HG11 | 2 | 0.67 | 0.05 | 0.67 |
| (2,415) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:82:VAL:HG13 | 2 | 0.67 | 0.05 | 0.67 |
| (2,415) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:114:VAL:HG12 | 2 | 0.67 | 0.05 | 0.67 |
| (2,415) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:114:VAL:HG11 | 2 | 0.67 | 0.05 | 0.67 |
| (2,415) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:114:VAL:HG13 | 2 | 0.67 | 0.05 | 0.67 |
| (1,1814) | 1:A:81:LYS:H | 1:A:81:LYS:HB2 | 2 | 0.64 | 0.04 | 0.64 |
| (1,800) | 1:A:145:GLU:HG3 | 1:A:145:GLU:HB2 | 2 | 0.59 | 0.01 | 0.59 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:82:VAL:HG22 | 2 | 0.58 | 0.02 | 0.58 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:82:VAL:HG21 | 2 | 0.58 | 0.02 | 0.58 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:82:VAL:HG23 | 2 | 0.58 | 0.02 | 0.58 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:82:VAL:HG22 | 2 | 0.58 | 0.02 | 0.58 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:82:VAL:HG21 | 2 | 0.58 | 0.02 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:82:VAL:HG23 | 2 | 0.58 | 0.02 | 0.58 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:82:VAL:HG22 | 2 | 0.58 | 0.02 | 0.58 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:82:VAL:HG21 | 2 | 0.58 | 0.02 | 0.58 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:82:VAL:HG23 | 2 | 0.58 | 0.02 | 0.58 |
| (1,965) | 1:A:47:LYS:HD2 | 1:A:44:ARG:HA | 2 | 0.55 | 0.04 | 0.55 |
| (1,2220) | 1:A:76:LYS:H | 1:A:82:VAL:HG22 | 2 | 0.51 | 0.12 | 0.51 |
| (1,2220) | 1:A:76:LYS:H | 1:A:82:VAL:HG21 | 2 | 0.51 | 0.12 | 0.51 |
| (1,2220) | 1:A:76:LYS:H | 1:A:82:VAL:HG23 | 2 | 0.51 | 0.12 | 0.51 |
| (1,389) | 1:A:83:VAL:HA | 1:A:83:VAL:HG22 | 2 | 0.5 | 0.0 | 0.5 |
| (1,389) | 1:A:83:VAL:HA | 1:A:83:VAL:HG21 | 2 | 0.5 | 0.0 | 0.5 |
| (1,389) | 1:A:83:VAL:HA | 1:A:83:VAL:HG23 | 2 | 0.5 | 0.0 | 0.5 |
| (1,1606) | 1:A:49:GLN:H | 1:A:48:ASN:HB3 | 2 | 0.46 | 0.0 | 0.46 |
| (1,50) | 1:A:146:TRP:HB2 | 1:A:146:TRP:HD1 | 2 | 0.46 | 0.3 | 0.46 |
| (1,1939) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HG12 | 2 | 0.45 | 0.01 | 0.45 |
| (1,1939) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HG11 | 2 | 0.45 | 0.01 | 0.45 |
| (1,1939) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HG13 | 2 | 0.45 | 0.01 | 0.45 |
| (1,2062) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:48:ASN:HB3 | 2 | 0.44 | 0.02 | 0.44 |
| (1,2096) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 2 | 0.43 | 0.27 | 0.43 |
| (1,2096) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 2 | 0.43 | 0.27 | 0.43 |
| (1,2096) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 2 | 0.43 | 0.27 | 0.43 |
| (1,1091) | 1:A:4:LYS:HG3 | 1:A:5:TYR:H | 2 | 0.39 | 0.19 | 0.39 |
| (1,729) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 2 | 0.31 | 0.19 | 0.31 |
| (1,1041) | 1:A:74:ARG:HG3 | 1:A:75:PHE:H | 2 | 0.31 | 0.02 | 0.31 |
| (1,1454) | 1:A:141:ALA:H | 1:A:140:GLU:HA | 2 | 0.29 | 0.01 | 0.29 |
| (1,1207) | 1:A:138:ILE:H | 1:A:138:ILE:HG22 | 2 | 0.27 | 0.09 | 0.27 |
| (1,1207) | 1:A:138:ILE:H | 1:A:138:ILE:HG21 | 2 | 0.27 | 0.09 | 0.27 |
| (1,1207) | 1:A:138:ILE:H | 1:A:138:ILE:HG23 | 2 | 0.27 | 0.09 | 0.27 |
| (1,1042) | 1:A:74:ARG:HG3 | 1:A:74:ARG:HA | 2 | 0.26 | 0.01 | 0.26 |
| (1,805) | 1:A:145:GLU:HG2 | 1:A:145:GLU:HA | 2 | 0.26 | 0.01 | 0.26 |
| (1,1552) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:123:PHE:H | 2 | 0.24 | 0.03 | 0.24 |
| (1,574) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:48:ASN:HB2 | 2 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (1,1035) | 1:A:74:ARG:HG2 | 1:A:74:ARG:HA | 2 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (1,1519) | 1:A:135:LEU:H | 1:A:135:LEU:HB2 | 2 | 0.18 | 0.06 | 0.18 |
| (1,586) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HA | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,213) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:128:GLY:HA3 | 2 | 0.16 | 0.05 | 0.16 |
| (2,213) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:128:GLY:HA2 | 2 | 0.16 | 0.05 | 0.16 |
| (1,2015) | 1:A:104:ASN:HD22 | 1:A:100:THR:HG21 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,2015) | 1:A:104:ASN:HD22 | 1:A:100:THR:HG22 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,2015) | 1:A:104:ASN:HD22 | 1:A:100:THR:HG23 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,2074) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:84:ASN:HA | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,48) | 1:A:146:TRP:HD1 | 1:A:147:HIS:HA | 2 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (2,551) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:20:LYS:HG3 | 2 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

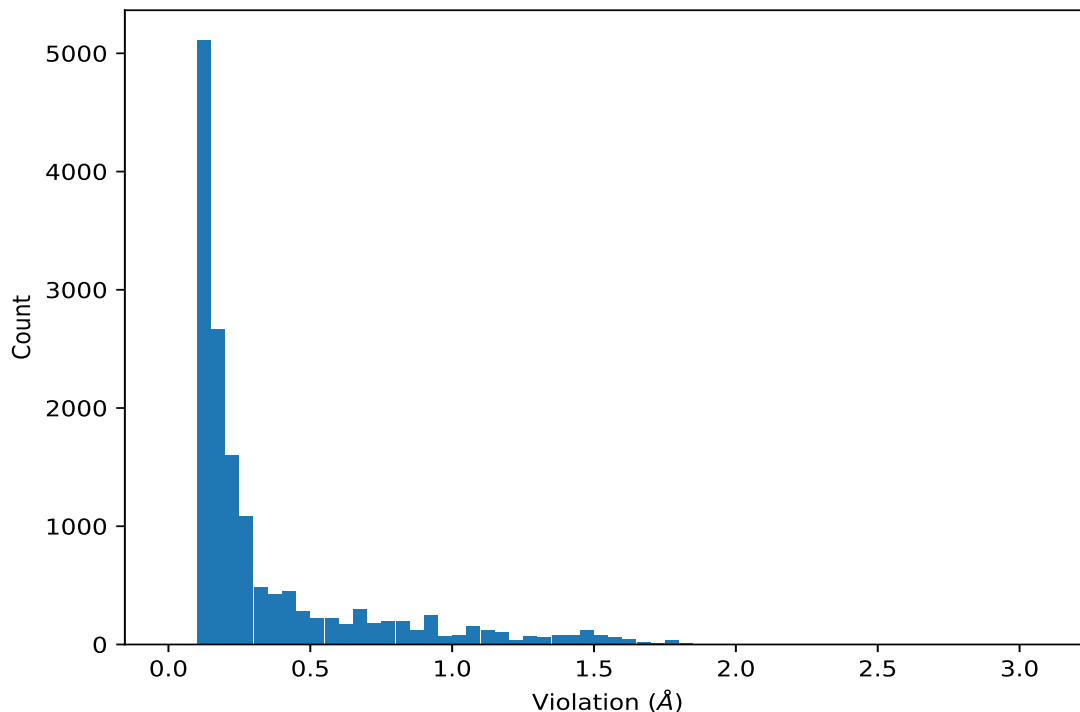
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,551) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:56:ARG:HG3 | 2 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,551) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:56:ARG:HG2 | 2 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,23) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:82:VAL:HG12 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,23) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:82:VAL:HG11 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,23) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:82:VAL:HG13 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1115) | 1:A:33:VAL:HA | 1:A:122:LEU:HD22 | 2 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,1115) | 1:A:33:VAL:HA | 1:A:122:LEU:HD21 | 2 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,1115) | 1:A:33:VAL:HA | 1:A:122:LEU:HD23 | 2 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,1282) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:87:ILE:HD12 | 2 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1282) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:87:ILE:HD11 | 2 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1282) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:87:ILE:HD13 | 2 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,2224) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:77:ILE:HG12 | 2 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,31) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:43:LYS:HG2 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2234) | 1:A:86:ASN:H | 1:A:73:MET:HB2 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1086) | 1:A:115:VAL:HG12 | 1:A:54:LEU:HB3 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1086) | 1:A:115:VAL:HG11 | 1:A:54:LEU:HB3 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1086) | 1:A:115:VAL:HG13 | 1:A:54:LEU:HB3 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1183) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:65:ASP:HA | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1183) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:65:ASP:HA | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1183) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:65:ASP:HA | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,169) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:109:VAL:HA | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1227) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:32:LEU:HA | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1227) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:32:LEU:HA | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1227) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:32:LEU:HA | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1376) | 1:A:118:VAL:H | 1:A:29:VAL:HG12 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1376) | 1:A:118:VAL:H | 1:A:29:VAL:HG11 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1376) | 1:A:118:VAL:H | 1:A:29:VAL:HG13 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,305) | 1:A:20:LYS:HD3 | 1:A:20:LYS:HB2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,305) | 1:A:20:LYS:HD3 | 1:A:20:LYS:HB3 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1946) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HB2 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,56) | 1:A:5:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HD1 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,56) | 1:A:5:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HD2 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |

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) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,798) | 1:A:78:GLU:HG2 | 1:A:79:ASN:HB3 | 15 | 3.09 |
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 15 | 2.95 |
| (1,798) | 1:A:78:GLU:HG2 | 1:A:79:ASN:HB3 | 12 | 2.92 |
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 5 | 2.87 |
| (1,83) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HD12 | 9 | 2.85 |
| (1,83) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HD11 | 9 | 2.85 |
| (1,83) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HD13 | 9 | 2.85 |
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 18 | 2.84 |
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 3 | 2.77 |
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 10 | 2.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 6 | 2.65 |
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 8 | 2.65 |
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 13 | 2.64 |
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 4 | 2.6 |
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 14 | 2.54 |
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 11 | 2.51 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG12 | 12 | 2.5 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG11 | 12 | 2.5 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG13 | 12 | 2.5 |
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 7 | 2.49 |
| (1,137) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HD22 | 9 | 2.45 |
| (1,137) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HD21 | 9 | 2.45 |
| (1,137) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HD23 | 9 | 2.45 |
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 17 | 2.44 |
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 20 | 2.44 |
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 19 | 2.43 |
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 12 | 2.38 |
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 16 | 2.35 |
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 1 | 2.28 |
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 9 | 2.25 |
| (1,187) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:59:LEU:HD22 | 9 | 2.15 |
| (1,187) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:59:LEU:HD21 | 9 | 2.15 |
| (1,187) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:59:LEU:HD23 | 9 | 2.15 |
| (1,111) | 1:A:85:PHE:HD1 | 1:A:82:VAL:HG22 | 11 | 2.14 |
| (1,111) | 1:A:85:PHE:HD1 | 1:A:82:VAL:HG21 | 11 | 2.14 |
| (1,111) | 1:A:85:PHE:HD1 | 1:A:82:VAL:HG23 | 11 | 2.14 |
| (1,111) | 1:A:85:PHE:HD1 | 1:A:82:VAL:HG22 | 1 | 2.1 |
| (1,111) | 1:A:85:PHE:HD1 | 1:A:82:VAL:HG21 | 1 | 2.1 |
| (1,111) | 1:A:85:PHE:HD1 | 1:A:82:VAL:HG23 | 1 | 2.1 |
| (1,147) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:59:LEU:HD22 | 9 | 2.09 |
| (1,147) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:59:LEU:HD21 | 9 | 2.09 |
| (1,147) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:59:LEU:HD23 | 9 | 2.09 |
| (1,2) | 1:A:112:PHE:HE2 | 1:A:82:VAL:HG12 | 11 | 1.93 |
| (1,2) | 1:A:112:PHE:HE2 | 1:A:82:VAL:HG11 | 11 | 1.93 |
| (1,2) | 1:A:112:PHE:HE2 | 1:A:82:VAL:HG13 | 11 | 1.93 |
| (1,788) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:49:GLN:HE21 | 8 | 1.91 |
| (1,83) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HD12 | 16 | 1.9 |
| (1,83) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HD11 | 16 | 1.9 |
| (1,83) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HD13 | 16 | 1.9 |
| (1,788) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:49:GLN:HE21 | 18 | 1.88 |
| (1,788) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:49:GLN:HE21 | 13 | 1.84 |
| (1,83) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HD12 | 8 | 1.83 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,83) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HD11 | 8 | 1.83 |
| (1,83) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HD13 | 8 | 1.83 |
| (1,2) | 1:A:112:PHE:HE2 | 1:A:82:VAL:HG12 | 1 | 1.82 |
| (1,2) | 1:A:112:PHE:HE2 | 1:A:82:VAL:HG11 | 1 | 1.82 |
| (1,2) | 1:A:112:PHE:HE2 | 1:A:82:VAL:HG13 | 1 | 1.82 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 5 | 1.81 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 15 | 1.8 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 19 | 1.8 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 3 | 1.79 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 18 | 1.79 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 17 | 1.78 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 8 | 1.78 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 10 | 1.78 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 7 | 1.77 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 16 | 1.77 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 17 | 1.77 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 5 | 1.77 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD22 | 4 | 1.76 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD21 | 4 | 1.76 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD23 | 4 | 1.76 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD22 | 4 | 1.76 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD21 | 4 | 1.76 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD23 | 4 | 1.76 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD22 | 4 | 1.76 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD21 | 4 | 1.76 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD23 | 4 | 1.76 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 1.76 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 1.76 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 1.76 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 1.76 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 1.76 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 1.76 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 1.76 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 1.76 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 1.76 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 4 | 1.76 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 6 | 1.76 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 11 | 1.76 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 13 | 1.75 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 20 | 1.75 |
| (1,2095) | 1:A:16:GLN:HE22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 9 | 1.75 |
| (1,2095) | 1:A:16:GLN:HE22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 9 | 1.75 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2095) | 1:A:16:GLN:HE22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 9 | 1.75 |
| (1,798) | 1:A:78:GLU:HG2 | 1:A:79:ASN:HB3 | 2 | 1.74 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 9 | 1.74 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 20 | 1.74 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 12 | 1.73 |
| (1,2274) | 1:A:117:ASP:H | 1:A:118:VAL:HG22 | 11 | 1.72 |
| (1,2274) | 1:A:117:ASP:H | 1:A:118:VAL:HG21 | 11 | 1.72 |
| (1,2274) | 1:A:117:ASP:H | 1:A:118:VAL:HG23 | 11 | 1.72 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 14 | 1.71 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 1 | 1.71 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 2 | 1.71 |
| (1,612) | 1:A:40:GLY:HA3 | 1:A:43:LYS:HB2 | 14 | 1.71 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 9 | 1.71 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 9 | 1.7 |
| (1,798) | 1:A:78:GLU:HG2 | 1:A:79:ASN:HB3 | 18 | 1.7 |
| (1,788) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:49:GLN:HE21 | 16 | 1.7 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 5 | 1.69 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 3 | 1.69 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 3 | 1.69 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 3 | 1.69 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 3 | 1.69 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 3 | 1.69 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 3 | 1.69 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 3 | 1.69 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 3 | 1.69 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 3 | 1.69 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 19 | 1.67 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 20 | 1.67 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 2 | 1.67 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 12 | 1.67 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 4 | 1.67 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 2 | 1.66 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 8 | 1.66 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 11 | 1.66 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 20 | 1.66 |
| (1,535) | 1:A:39:SER:HA | 1:A:38:LYS:HG2 | 9 | 1.66 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 16 | 1.65 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 3 | 1.65 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 6 | 1.65 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 9 | 1.65 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 10 | 1.65 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 14 | 1.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 19 | 1.65 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 6 | 1.65 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 4 | 1.65 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 7 | 1.65 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 2 | 1.65 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 13 | 1.65 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 17 | 1.65 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 1 | 1.64 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 4 | 1.64 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 7 | 1.64 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 17 | 1.64 |
| (1,535) | 1:A:39:SER:HA | 1:A:38:LYS:HG2 | 1 | 1.64 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 18 | 1.64 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 1 | 1.64 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 7 | 1.64 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 10 | 1.64 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 4 | 1.63 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 18 | 1.63 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 12 | 1.63 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 15 | 1.63 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 15 | 1.63 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 3 | 1.63 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 8 | 1.63 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 19 | 1.63 |
| (1,788) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:49:GLN:HE21 | 14 | 1.62 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 16 | 1.62 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 18 | 1.62 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 5 | 1.62 |
| (1,788) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:49:GLN:HE21 | 5 | 1.61 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 4 | 1.61 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 14 | 1.61 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 2 | 1.6 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 3 | 1.6 |
| (1,783) | 1:A:99:GLU:HG3 | 1:A:93:LEU:HB3 | 13 | 1.6 |
| (1,535) | 1:A:39:SER:HA | 1:A:38:LYS:HG2 | 7 | 1.6 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 18 | 1.6 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 5 | 1.59 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 19 | 1.59 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG22 | 1 | 1.59 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG21 | 1 | 1.59 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG23 | 1 | 1.59 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG22 | 1 | 1.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG21 | 1 | 1.59 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG23 | 1 | 1.59 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG22 | 1 | 1.59 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG21 | 1 | 1.59 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG23 | 1 | 1.59 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 14 | 1.59 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 11 | 1.59 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 11 | 1.59 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 11 | 1.59 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 12 | 1.59 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 12 | 1.59 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 12 | 1.59 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 13 | 1.59 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 13 | 1.59 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 13 | 1.59 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 1 | 1.58 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 6 | 1.58 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 11 | 1.58 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 12 | 1.58 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 1 | 1.58 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 11 | 1.58 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 15 | 1.58 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 20 | 1.58 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 8 | 1.57 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 10 | 1.57 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 12 | 1.57 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 16 | 1.57 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 2 | 1.57 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 2 | 1.57 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 2 | 1.57 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 15 | 1.56 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 2 | 1.56 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 5 | 1.56 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 16 | 1.56 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 16 | 1.56 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 16 | 1.56 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 16 | 1.56 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 16 | 1.56 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 16 | 1.56 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 16 | 1.56 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 16 | 1.56 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 16 | 1.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 9 | 1.56 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 9 | 1.56 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 9 | 1.56 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 5 | 1.55 |
| (1,798) | 1:A:78:GLU:HG2 | 1:A:79:ASN:HB3 | 5 | 1.55 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 11 | 1.55 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 17 | 1.55 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 6 | 1.55 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 4 | 1.55 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 4 | 1.55 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 4 | 1.55 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 10 | 1.54 |
| (1,535) | 1:A:39:SER:HA | 1:A:38:LYS:HG2 | 14 | 1.54 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 6 | 1.54 |
| (1,798) | 1:A:78:GLU:HG2 | 1:A:79:ASN:HB3 | 8 | 1.53 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 9 | 1.53 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 14 | 1.53 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 14 | 1.53 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 14 | 1.53 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 14 | 1.53 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 14 | 1.53 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 14 | 1.53 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 14 | 1.53 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 14 | 1.53 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 14 | 1.53 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 7 | 1.53 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 7 | 1.53 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 7 | 1.53 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 7 | 1.53 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 7 | 1.53 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 7 | 1.53 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 19 | 1.53 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 19 | 1.53 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 19 | 1.53 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 7 | 1.52 |
| (1,931) | 1:A:44:ARG:HB2 | 1:A:43:LYS:HG3 | 13 | 1.52 |
| (1,798) | 1:A:78:GLU:HG2 | 1:A:79:ASN:HB3 | 14 | 1.52 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 13 | 1.52 |
| (1,2200) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 9 | 1.52 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 5 | 1.52 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 5 | 1.52 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 5 | 1.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 10 | 1.52 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 10 | 1.52 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 10 | 1.52 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 2 | 1.52 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 2 | 1.52 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 2 | 1.52 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 5 | 1.52 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 5 | 1.52 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 5 | 1.52 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 8 | 1.52 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 8 | 1.52 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 8 | 1.52 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 10 | 1.52 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 10 | 1.52 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 10 | 1.52 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 14 | 1.52 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 14 | 1.52 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 14 | 1.52 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 18 | 1.52 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 18 | 1.52 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 18 | 1.52 |
| (1,798) | 1:A:78:GLU:HG2 | 1:A:79:ASN:HB3 | 17 | 1.51 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 1 | 1.51 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 1 | 1.51 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 1 | 1.51 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 12 | 1.51 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 12 | 1.51 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 12 | 1.51 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 17 | 1.51 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 17 | 1.51 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 17 | 1.51 |
| (1,1937) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:82:VAL:HG22 | 11 | 1.5 |
| (1,1937) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:82:VAL:HG21 | 11 | 1.5 |
| (1,1937) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:82:VAL:HG23 | 11 | 1.5 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 4 | 1.5 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 4 | 1.5 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 4 | 1.5 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 6 | 1.5 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 6 | 1.5 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 6 | 1.5 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 9 | 1.5 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 9 | 1.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 9 | 1.5 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 11 | 1.5 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 11 | 1.5 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 11 | 1.5 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 16 | 1.5 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 16 | 1.5 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 16 | 1.5 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 20 | 1.5 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 20 | 1.5 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 20 | 1.5 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 9 | 1.49 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 9 | 1.49 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 9 | 1.49 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 20 | 1.49 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 20 | 1.49 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 20 | 1.49 |
| (1,83) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HD12 | 17 | 1.49 |
| (1,83) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HD11 | 17 | 1.49 |
| (1,83) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HD13 | 17 | 1.49 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 13 | 1.49 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 20 | 1.49 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 15 | 1.49 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 15 | 1.49 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 15 | 1.49 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 15 | 1.49 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 15 | 1.49 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 15 | 1.49 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 15 | 1.49 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 15 | 1.49 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 15 | 1.49 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 18 | 1.49 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 18 | 1.49 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 18 | 1.49 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 19 | 1.49 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 19 | 1.49 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 19 | 1.49 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 3 | 1.49 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 3 | 1.49 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 3 | 1.49 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD12 | 15 | 1.49 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD11 | 15 | 1.49 |
| (1,1151) | 1:A:21:LEU:HA | 1:A:21:LEU:HD13 | 15 | 1.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 16 | 1.48 |
| (1,535) | 1:A:39:SER:HA | 1:A:38:LYS:HG2 | 11 | 1.48 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 20 | 1.48 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 11 | 1.48 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 11 | 1.48 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 11 | 1.48 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 11 | 1.48 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 11 | 1.48 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 11 | 1.48 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 11 | 1.48 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 11 | 1.48 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 11 | 1.48 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 19 | 1.48 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 19 | 1.48 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 19 | 1.48 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 19 | 1.48 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 19 | 1.48 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 19 | 1.48 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 19 | 1.48 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 19 | 1.48 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 19 | 1.48 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 1.47 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 1.47 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 1.47 |
| (1,798) | 1:A:78:GLU:HG2 | 1:A:79:ASN:HB3 | 7 | 1.47 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG22 | 11 | 1.47 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG21 | 11 | 1.47 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG23 | 11 | 1.47 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG22 | 11 | 1.47 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG21 | 11 | 1.47 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG23 | 11 | 1.47 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG22 | 11 | 1.47 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG21 | 11 | 1.47 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG23 | 11 | 1.47 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 2 | 1.47 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 2 | 1.47 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 2 | 1.47 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 2 | 1.47 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 2 | 1.47 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 2 | 1.47 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 2 | 1.47 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 2 | 1.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 2 | 1.47 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 6 | 1.47 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 6 | 1.47 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 6 | 1.47 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 18 | 1.47 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 18 | 1.47 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 18 | 1.47 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 1.46 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 1.46 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 1.46 |
| (1,788) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:49:GLN:HE21 | 11 | 1.46 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 3 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 5 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 5 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 5 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 5 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 5 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 5 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 5 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 5 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 5 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 12 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 12 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 12 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 12 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 12 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 12 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 12 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 12 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 12 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 18 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 18 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 18 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 18 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 18 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 18 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 18 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 18 | 1.46 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 18 | 1.46 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 3 | 1.46 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 3 | 1.46 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 3 | 1.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 10 | 1.46 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 10 | 1.46 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 10 | 1.46 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 13 | 1.46 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 13 | 1.46 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 13 | 1.46 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 15 | 1.46 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 15 | 1.46 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 15 | 1.46 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 1.45 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 1.45 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 1.45 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 1.45 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 1.45 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 1.45 |
| (1,798) | 1:A:78:GLU:HG2 | 1:A:79:ASN:HB3 | 3 | 1.45 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 10 | 1.45 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 7 | 1.45 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 7 | 1.45 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 11 | 1.45 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 15 | 1.45 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 16 | 1.45 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG12 | 9 | 1.45 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG11 | 9 | 1.45 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG13 | 9 | 1.45 |
| (1,1937) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:82:VAL:HG22 | 1 | 1.45 |
| (1,1937) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:82:VAL:HG21 | 1 | 1.45 |
| (1,1937) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:82:VAL:HG23 | 1 | 1.45 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 2 | 1.45 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 2 | 1.45 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 2 | 1.45 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 3 | 1.45 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 3 | 1.45 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 3 | 1.45 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 5 | 1.45 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 5 | 1.45 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 5 | 1.45 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 8 | 1.45 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 8 | 1.45 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 8 | 1.45 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 16 | 1.45 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 16 | 1.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 16 | 1.45 |
| (1,798) | 1:A:78:GLU:HG2 | 1:A:79:ASN:HB3 | 9 | 1.44 |
| (1,788) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:49:GLN:HE21 | 10 | 1.44 |
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 14 | 1.44 |
| (1,535) | 1:A:39:SER:HA | 1:A:38:LYS:HG2 | 19 | 1.44 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 9 | 1.44 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 9 | 1.44 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 9 | 1.44 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 9 | 1.44 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 9 | 1.44 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 9 | 1.44 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 9 | 1.44 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 9 | 1.44 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 9 | 1.44 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 4 | 1.44 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 4 | 1.44 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 4 | 1.44 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 12 | 1.44 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 12 | 1.44 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 12 | 1.44 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 14 | 1.44 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 14 | 1.44 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 14 | 1.44 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 20 | 1.43 |
| (1,788) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:49:GLN:HE21 | 7 | 1.43 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 3 | 1.43 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 17 | 1.43 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 1 | 1.43 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 1 | 1.43 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 1 | 1.43 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 1 | 1.43 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 1 | 1.43 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 1 | 1.43 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 1 | 1.43 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 1 | 1.43 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 1 | 1.43 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 7 | 1.43 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 7 | 1.43 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 7 | 1.43 |
| (1,535) | 1:A:39:SER:HA | 1:A:38:LYS:HG2 | 16 | 1.42 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 17 | 1.42 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 17 | 1.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 17 | 1.42 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 17 | 1.42 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 1.41 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 1.41 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 1.41 |
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 15 | 1.4 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 1 | 1.4 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 6 | 1.4 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 6 | 1.4 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 6 | 1.4 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 6 | 1.4 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 6 | 1.4 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 6 | 1.4 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 6 | 1.4 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 6 | 1.4 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 6 | 1.4 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 14 | 1.39 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 14 | 1.39 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 20 | 1.39 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 20 | 1.39 |
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 4 | 1.39 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 2 | 1.39 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 11 | 1.39 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 11 | 1.39 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 11 | 1.39 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 13 | 1.38 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 13 | 1.38 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 19 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 7 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 7 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 7 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 7 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 7 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 7 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 7 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 7 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 7 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 17 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 17 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 17 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 17 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 17 | 1.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 17 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 17 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 17 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 17 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 20 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 20 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 20 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 20 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 20 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 20 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 20 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 20 | 1.38 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 20 | 1.38 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 2 | 1.38 |
| (1,788) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:49:GLN:HE21 | 15 | 1.37 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 17 | 1.37 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 15 | 1.37 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 19 | 1.37 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 19 | 1.37 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 19 | 1.37 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 19 | 1.37 |
| (1,835) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:16:GLN:HG2 | 8 | 1.36 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 8 | 1.36 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 18 | 1.36 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 3 | 1.36 |
| (1,1922) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 5 | 1.36 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 16 | 1.35 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 16 | 1.35 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 19 | 1.35 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 19 | 1.35 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 1.35 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 1.35 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 1.35 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 12 | 1.35 |
| (1,2142) | 1:A:106:ASN:H | 1:A:106:ASN:HD22 | 19 | 1.35 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 11 | 1.35 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 14 | 1.35 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 15 | 1.35 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 1 | 1.35 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 3 | 1.35 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 13 | 1.35 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 16 | 1.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 18 | 1.35 |
| (1,835) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:16:GLN:HG2 | 20 | 1.34 |
| (1,715) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:23:ILE:HB | 10 | 1.34 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 14 | 1.34 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 1 | 1.34 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 9 | 1.34 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 2 | 1.34 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 9 | 1.34 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 1 | 1.34 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 1 | 1.34 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 1 | 1.34 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 10 | 1.33 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 10 | 1.33 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 10 | 1.33 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 10 | 1.33 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 10 | 1.33 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 10 | 1.33 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 10 | 1.33 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 10 | 1.33 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 10 | 1.33 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 20 | 1.33 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HB2 | 9 | 1.33 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HB2 | 9 | 1.33 |
| (1,1288) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HB2 | 9 | 1.33 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 15 | 1.32 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 15 | 1.32 |
| (1,788) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:49:GLN:HE21 | 3 | 1.32 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 16 | 1.32 |
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 2 | 1.32 |
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 11 | 1.32 |
| (1,2142) | 1:A:106:ASN:H | 1:A:106:ASN:HD22 | 14 | 1.32 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 10 | 1.32 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 4 | 1.32 |
| (1,1344) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:17:LEU:HD12 | 4 | 1.32 |
| (1,1344) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:17:LEU:HD11 | 4 | 1.32 |
| (1,1344) | 1:A:17:LEU:HA | 1:A:17:LEU:HD13 | 4 | 1.32 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 5 | 1.31 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 5 | 1.31 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 5 | 1.31 |
| (1,715) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:23:ILE:HB | 17 | 1.31 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 8 | 1.31 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 8 | 1.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 8 | 1.31 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 8 | 1.31 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 8 | 1.31 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 8 | 1.31 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 8 | 1.31 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 8 | 1.31 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 8 | 1.31 |
| (1,2142) | 1:A:106:ASN:H | 1:A:106:ASN:HD22 | 6 | 1.31 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 5 | 1.31 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 8 | 1.31 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 6 | 1.31 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 6 | 1.31 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 6 | 1.31 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 15 | 1.3 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 15 | 1.3 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 12 | 1.3 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 2 | 1.3 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 2 | 1.3 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 2 | 1.3 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 10 | 1.3 |
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 1 | 1.3 |
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 20 | 1.3 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 8 | 1.3 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 20 | 1.3 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 20 | 1.3 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 2 | 1.29 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 2 | 1.29 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 17 | 1.29 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 17 | 1.29 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 11 | 1.29 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 18 | 1.29 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 18 | 1.29 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 18 | 1.29 |
| (1,788) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:49:GLN:HE21 | 2 | 1.29 |
| (1,788) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:49:GLN:HE21 | 4 | 1.29 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 1 | 1.29 |
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 18 | 1.29 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 4 | 1.29 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 4 | 1.29 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 4 | 1.29 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 4 | 1.29 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 4 | 1.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 4 | 1.29 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 4 | 1.29 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 4 | 1.29 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 4 | 1.29 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 15 | 1.28 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 15 | 1.28 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 15 | 1.28 |
| (1,788) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:49:GLN:HE21 | 17 | 1.28 |
| (1,591) | 1:A:141:ALA:HA | 1:A:142:GLN:HB2 | 12 | 1.28 |
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 17 | 1.28 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 13 | 1.28 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD12 | 13 | 1.28 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD11 | 13 | 1.28 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD22 | 1:A:23:ILE:HD13 | 13 | 1.28 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD12 | 13 | 1.28 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD11 | 13 | 1.28 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD21 | 1:A:23:ILE:HD13 | 13 | 1.28 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD12 | 13 | 1.28 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD11 | 13 | 1.28 |
| (1,2295) | 1:A:21:LEU:HD23 | 1:A:23:ILE:HD13 | 13 | 1.28 |
| (1,2142) | 1:A:106:ASN:H | 1:A:106:ASN:HD22 | 16 | 1.28 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 7 | 1.28 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 12 | 1.28 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 16 | 1.28 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 3 | 1.28 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 7 | 1.28 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 10 | 1.28 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 14 | 1.28 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 17 | 1.28 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 8 | 1.27 |
| (1,2225) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:79:ASN:HB3 | 9 | 1.27 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 4 | 1.27 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 6 | 1.27 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 11 | 1.27 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 18 | 1.27 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 12 | 1.26 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 12 | 1.26 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 1 | 1.26 |
| (1,715) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:23:ILE:HB | 7 | 1.26 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 16 | 1.26 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 13 | 1.26 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 15 | 1.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:72:ASN:HD21 | 6 | 1.26 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:72:ASN:HD21 | 6 | 1.26 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:72:ASN:HD21 | 6 | 1.26 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:72:ASN:HD21 | 10 | 1.26 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:72:ASN:HD21 | 10 | 1.26 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:72:ASN:HD21 | 10 | 1.26 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 11 | 1.25 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 11 | 1.25 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 4 | 1.25 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 19 | 1.25 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 5 | 1.25 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 12 | 1.25 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 8 | 1.25 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 18 | 1.24 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 18 | 1.24 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 18 | 1.24 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 18 | 1.24 |
| (1,788) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:49:GLN:HE21 | 1 | 1.24 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 3 | 1.24 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 9 | 1.24 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 1.24 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 1.24 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 1.24 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 7 | 1.23 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 9 | 1.23 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 13 | 1.23 |
| (1,839) | 1:A:76:LYS:HB3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 9 | 1.23 |
| (1,839) | 1:A:76:LYS:HB3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 9 | 1.23 |
| (1,839) | 1:A:76:LYS:HB3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 9 | 1.23 |
| (1,835) | 1:A:16:GLN:H | 1:A:16:GLN:HG2 | 6 | 1.23 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 4 | 1.23 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 13 | 1.23 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 15 | 1.23 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 5 | 1.22 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 5 | 1.22 |
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 3 | 1.22 |
| (1,2225) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:79:ASN:HB3 | 12 | 1.22 |
| (1,1522) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:113:ASN:HD22 | 1 | 1.22 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 17 | 1.22 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 1.21 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 1.21 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 1.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 5 | 1.21 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 19 | 1.21 |
| (1,83) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HD12 | 12 | 1.21 |
| (1,83) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HD11 | 12 | 1.21 |
| (1,83) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HD13 | 12 | 1.21 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 3 | 1.21 |
| (1,338) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:51:ALA:HB2 | 10 | 1.21 |
| (1,338) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:51:ALA:HB1 | 10 | 1.21 |
| (1,338) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:51:ALA:HB3 | 10 | 1.21 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 3 | 1.2 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 6 | 1.2 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 12 | 1.2 |
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 7 | 1.2 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 8 | 1.19 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 8 | 1.19 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 20 | 1.19 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 20 | 1.19 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 4 | 1.19 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 16 | 1.19 |
| (1,338) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:51:ALA:HB2 | 17 | 1.19 |
| (1,338) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:51:ALA:HB1 | 17 | 1.19 |
| (1,338) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:51:ALA:HB3 | 17 | 1.19 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 18 | 1.19 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 18 | 1.19 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 18 | 1.19 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 18 | 1.19 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 18 | 1.19 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 18 | 1.19 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 18 | 1.19 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 18 | 1.19 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 18 | 1.19 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 18 | 1.19 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 12 | 1.19 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 3 | 1.19 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 11 | 1.19 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 16 | 1.18 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 16 | 1.18 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 7 | 1.18 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 7 | 1.18 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 6 | 1.18 |
| (1,338) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:51:ALA:HB2 | 16 | 1.18 |
| (1,338) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:51:ALA:HB1 | 16 | 1.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,338) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:51:ALA:HB3 | 16 | 1.18 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 6 | 1.18 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 6 | 1.18 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 6 | 1.18 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 6 | 1.18 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 6 | 1.18 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 6 | 1.18 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 6 | 1.18 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 6 | 1.18 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 6 | 1.18 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 14 | 1.18 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 14 | 1.18 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 14 | 1.18 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 14 | 1.18 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 14 | 1.18 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 14 | 1.18 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 14 | 1.18 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 14 | 1.18 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 14 | 1.18 |
| (1,2225) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:79:ASN:HB3 | 8 | 1.18 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 1 | 1.18 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 6 | 1.18 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 14 | 1.18 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 6 | 1.17 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 6 | 1.17 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 14 | 1.17 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 15 | 1.17 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 17 | 1.17 |
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 10 | 1.17 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 9 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 3 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 3 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 3 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 3 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 3 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 3 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 3 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 3 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 3 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 5 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 5 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 5 | 1.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 5 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 5 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 5 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 5 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 5 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 5 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 16 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 16 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 16 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 16 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 16 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 16 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 16 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 16 | 1.17 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 16 | 1.17 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 20 | 1.17 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 20 | 1.17 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 20 | 1.17 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 13 | 1.16 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 13 | 1.16 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 1.16 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 1.16 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 1.16 |
| (1,715) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:23:ILE:HB | 1 | 1.16 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 5 | 1.16 |
| (1,2133) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:61:TYR:HB3 | 6 | 1.16 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 7 | 1.16 |
| (1,1059) | 1:A:17:LEU:HD22 | 1:A:14:LEU:HA | 4 | 1.16 |
| (1,1059) | 1:A:17:LEU:HD21 | 1:A:14:LEU:HA | 4 | 1.16 |
| (1,1059) | 1:A:17:LEU:HD23 | 1:A:14:LEU:HA | 4 | 1.16 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 3 | 1.15 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 3 | 1.15 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 1.15 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 1.15 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 1.15 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 2 | 1.15 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 17 | 1.15 |
| (1,72) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:82:VAL:HG12 | 11 | 1.15 |
| (1,72) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:82:VAL:HG11 | 11 | 1.15 |
| (1,72) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:82:VAL:HG13 | 11 | 1.15 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 11 | 1.15 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 18 | 1.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 13 | 1.15 |
| (1,338) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:51:ALA:HB2 | 18 | 1.15 |
| (1,338) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:51:ALA:HB1 | 18 | 1.15 |
| (1,338) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:51:ALA:HB3 | 18 | 1.15 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 12 | 1.15 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 12 | 1.15 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 12 | 1.15 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 12 | 1.15 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 12 | 1.15 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 12 | 1.15 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 12 | 1.15 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 12 | 1.15 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 12 | 1.15 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 19 | 1.15 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 19 | 1.15 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 19 | 1.15 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 19 | 1.15 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 19 | 1.15 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 19 | 1.15 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 19 | 1.15 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 19 | 1.15 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 19 | 1.15 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 2 | 1.15 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 14 | 1.14 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 14 | 1.14 |
| (1,715) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:23:ILE:HB | 20 | 1.14 |
| (1,683) | 1:A:34:ASP:HB3 | 1:A:35:GLU:HG2 | 20 | 1.14 |
| (1,355) | 1:A:110:SER:HB3 | 1:A:111:ILE:HG12 | 11 | 1.14 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 11 | 1.14 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 11 | 1.14 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 11 | 1.14 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 11 | 1.14 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 11 | 1.14 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 11 | 1.14 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 11 | 1.14 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 11 | 1.14 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 11 | 1.14 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 11 | 1.14 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 5 | 1.14 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 1.14 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 1.14 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 1.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 1.14 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 1.14 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 1.14 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 2 | 1.13 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 2 | 1.13 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 10 | 1.13 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 18 | 1.13 |
| (1,563) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 9 | 1.13 |
| (1,563) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 9 | 1.13 |
| (1,563) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 9 | 1.13 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 2 | 1.13 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 2 | 1.13 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 2 | 1.13 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 2 | 1.13 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 2 | 1.13 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 2 | 1.13 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 2 | 1.13 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 2 | 1.13 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 2 | 1.13 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 9 | 1.13 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 9 | 1.13 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 9 | 1.13 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 7 | 1.12 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 7 | 1.12 |
| (1,715) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:23:ILE:HB | 4 | 1.12 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 4 | 1.12 |
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 6 | 1.12 |
| (1,532) | 1:A:135:LEU:HA | 1:A:135:LEU:HD12 | 20 | 1.12 |
| (1,532) | 1:A:135:LEU:HA | 1:A:135:LEU:HD11 | 20 | 1.12 |
| (1,532) | 1:A:135:LEU:HA | 1:A:135:LEU:HD13 | 20 | 1.12 |
| (1,2225) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:79:ASN:HB3 | 15 | 1.12 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 19 | 1.12 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 8 | 1.12 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 8 | 1.12 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 8 | 1.12 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 5 | 1.11 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 5 | 1.11 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 4 | 1.11 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 4 | 1.11 |
| (1,355) | 1:A:110:SER:HB3 | 1:A:111:ILE:HG12 | 6 | 1.11 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 15 | 1.11 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 15 | 1.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 15 | 1.11 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 15 | 1.11 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 15 | 1.11 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 15 | 1.11 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 15 | 1.11 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 15 | 1.11 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 15 | 1.11 |
| (1,2280) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:122:LEU:HD12 | 11 | 1.11 |
| (1,2280) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:122:LEU:HD11 | 11 | 1.11 |
| (1,2280) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:122:LEU:HD13 | 11 | 1.11 |
| (1,2280) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:122:LEU:HD12 | 11 | 1.11 |
| (1,2280) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:122:LEU:HD11 | 11 | 1.11 |
| (1,2280) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:122:LEU:HD13 | 11 | 1.11 |
| (1,2280) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:122:LEU:HD12 | 11 | 1.11 |
| (1,2280) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:122:LEU:HD11 | 11 | 1.11 |
| (1,2280) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:122:LEU:HD13 | 11 | 1.11 |
| (1,1394) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:147:HIS:HB2 | 12 | 1.11 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 8 | 1.11 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 8 | 1.11 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 8 | 1.11 |
| (1,577) | 1:A:12:ALA:HA | 1:A:15:LYS:HB2 | 8 | 1.1 |
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 12 | 1.1 |
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 19 | 1.1 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 3 | 1.1 |
| (1,355) | 1:A:110:SER:HB3 | 1:A:111:ILE:HG12 | 14 | 1.1 |
| (1,1598) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HG3 | 13 | 1.1 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 10 | 1.1 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 12 | 1.1 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 6 | 1.09 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 6 | 1.09 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 11 | 1.09 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 11 | 1.09 |
| (1,535) | 1:A:39:SER:HA | 1:A:38:LYS:HG2 | 12 | 1.09 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 1 | 1.09 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 13 | 1.09 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 13 | 1.09 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 13 | 1.09 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 13 | 1.09 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 13 | 1.09 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 13 | 1.09 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 13 | 1.09 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 13 | 1.09 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 13 | 1.09 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 1.09 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 17 | 1.08 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 17 | 1.08 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 12 | 1.08 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 12 | 1.08 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 17 | 1.08 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 17 | 1.08 |
| (1,999) | 1:A:20:LYS:HD2 | 1:A:20:LYS:H | 5 | 1.08 |
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 18 | 1.08 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 8 | 1.08 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 4 | 1.08 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 4 | 1.08 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 4 | 1.08 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 4 | 1.08 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 4 | 1.08 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 4 | 1.08 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 4 | 1.08 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 4 | 1.08 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 4 | 1.08 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 8 | 1.08 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 8 | 1.08 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 8 | 1.08 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 8 | 1.08 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 8 | 1.08 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 8 | 1.08 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 8 | 1.08 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 8 | 1.08 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 8 | 1.08 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 13 | 1.08 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 13 | 1.08 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 13 | 1.08 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 13 | 1.08 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 13 | 1.08 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 13 | 1.08 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 13 | 1.08 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 13 | 1.08 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 13 | 1.08 |
| (1,2225) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:79:ASN:HB3 | 7 | 1.08 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 11 | 1.08 |
| (1,1598) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HG3 | 2 | 1.08 |
| (1,1598) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HG3 | 20 | 1.08 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1394) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:147:HIS:HB2 | 15 | 1.08 |
| (1,1370) | 1:A:55:SER:HA | 1:A:17:LEU:HD12 | 4 | 1.08 |
| (1,1370) | 1:A:55:SER:HA | 1:A:17:LEU:HD11 | 4 | 1.08 |
| (1,1370) | 1:A:55:SER:HA | 1:A:17:LEU:HD13 | 4 | 1.08 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 19 | 1.08 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 19 | 1.08 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 19 | 1.08 |
| (1,1074) | 1:A:76:LYS:HG3 | 1:A:77:ILE:H | 18 | 1.08 |
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 8 | 1.07 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 14 | 1.07 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 16 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 8 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 8 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 8 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 8 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 8 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 8 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 8 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 8 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 8 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 9 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 9 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 9 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 9 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 9 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 9 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 9 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 9 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 9 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 10 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 10 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 10 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 10 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 10 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 10 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 10 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 10 | 1.07 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 10 | 1.07 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 20 | 1.07 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 20 | 1.07 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 20 | 1.07 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 20 | 1.07 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 20 | 1.07 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 20 | 1.07 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 20 | 1.07 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 20 | 1.07 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 20 | 1.07 |
| (1,2225) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:79:ASN:HB3 | 14 | 1.07 |
| (1,1598) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HG3 | 4 | 1.07 |
| (1,1598) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HG3 | 8 | 1.07 |
| (1,1598) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HG3 | 15 | 1.07 |
| (1,1394) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:147:HIS:HB2 | 17 | 1.07 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 6 | 1.07 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 6 | 1.07 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 6 | 1.07 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 16 | 1.06 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 16 | 1.06 |
| (1,887) | 1:A:119:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HB3 | 2 | 1.06 |
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 5 | 1.06 |
| (1,355) | 1:A:110:SER:HB3 | 1:A:111:ILE:HG12 | 8 | 1.06 |
| (1,2310) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:33:VAL:HG22 | 11 | 1.06 |
| (1,2310) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:33:VAL:HG21 | 11 | 1.06 |
| (1,2310) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:33:VAL:HG23 | 11 | 1.06 |
| (1,2310) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:33:VAL:HG22 | 11 | 1.06 |
| (1,2310) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:33:VAL:HG21 | 11 | 1.06 |
| (1,2310) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:33:VAL:HG23 | 11 | 1.06 |
| (1,2310) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:33:VAL:HG22 | 11 | 1.06 |
| (1,2310) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:33:VAL:HG21 | 11 | 1.06 |
| (1,2310) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:33:VAL:HG23 | 11 | 1.06 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 7 | 1.06 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 7 | 1.06 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 7 | 1.06 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 7 | 1.06 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 7 | 1.06 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 7 | 1.06 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 7 | 1.06 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 7 | 1.06 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 7 | 1.06 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 10 | 1.06 |
| (1,1394) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:147:HIS:HB2 | 3 | 1.06 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 4 | 1.05 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 4 | 1.05 |
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 9 | 1.05 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 19 | 1.05 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 6 | 1.05 |
| (1,355) | 1:A:110:SER:HB3 | 1:A:111:ILE:HG12 | 10 | 1.05 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 1 | 1.05 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 1 | 1.05 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 1 | 1.05 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 1 | 1.05 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 1 | 1.05 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 1 | 1.05 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 1 | 1.05 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 1 | 1.05 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 1 | 1.05 |
| (1,2158) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 10 | 1.05 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 1 | 1.05 |
| (1,1598) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HG3 | 5 | 1.05 |
| (1,1394) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:147:HIS:HB2 | 14 | 1.05 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 1.05 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 1.05 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 1.05 |
| (1,535) | 1:A:39:SER:HA | 1:A:38:LYS:HG2 | 4 | 1.04 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 18 | 1.04 |
| (1,2225) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:79:ASN:HB3 | 3 | 1.04 |
| (1,1598) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HG3 | 6 | 1.04 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 10 | 1.04 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 10 | 1.04 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 10 | 1.04 |
| (1,1074) | 1:A:76:LYS:HG3 | 1:A:77:ILE:H | 15 | 1.04 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 11 | 1.03 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 11 | 1.03 |
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 13 | 1.03 |
| (1,72) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:82:VAL:HG12 | 1 | 1.03 |
| (1,72) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:82:VAL:HG11 | 1 | 1.03 |
| (1,72) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:82:VAL:HG13 | 1 | 1.03 |
| (1,331) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:104:ASN:HB3 | 1 | 1.03 |
| (1,2225) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:79:ASN:HB3 | 17 | 1.03 |
| (1,2158) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 17 | 1.03 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 3 | 1.03 |
| (1,1598) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HG3 | 3 | 1.03 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 10 | 1.02 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 10 | 1.02 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 12 | 1.02 |
| (1,211) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:82:VAL:HG22 | 11 | 1.02 |
| (1,211) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:82:VAL:HG21 | 11 | 1.02 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,211) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:82:VAL:HG23 | 11 | 1.02 |
| (1,1598) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HG3 | 1 | 1.02 |
| (1,1598) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HG3 | 9 | 1.02 |
| (1,1598) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HG3 | 17 | 1.02 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 10 | 1.02 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 10 | 1.02 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 10 | 1.02 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 1 | 1.01 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 1 | 1.01 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 8 | 1.01 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 8 | 1.01 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 4 | 1.01 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 20 | 1.01 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 20 | 1.01 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 20 | 1.01 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 20 | 1.01 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 20 | 1.01 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 20 | 1.01 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 20 | 1.01 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 20 | 1.01 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 20 | 1.01 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 3 | 1.01 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 3 | 1.01 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 3 | 1.01 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 3 | 1.01 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 3 | 1.01 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 3 | 1.01 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 3 | 1.01 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 3 | 1.01 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 3 | 1.01 |
| (1,1598) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HG3 | 10 | 1.01 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 17 | 1.01 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 17 | 1.01 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 17 | 1.01 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 7 | 1.0 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 7 | 1.0 |
| (1,999) | 1:A:20:LYS:HD2 | 1:A:20:LYS:H | 4 | 1.0 |
| (1,999) | 1:A:20:LYS:HD2 | 1:A:20:LYS:H | 17 | 1.0 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 5 | 1.0 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 16 | 1.0 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 2 | 1.0 |
| (1,1866) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HB2 | 19 | 1.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1598) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HG3 | 12 | 1.0 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 1 | 1.0 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 1 | 1.0 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 1 | 1.0 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 5 | 1.0 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 5 | 1.0 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 5 | 1.0 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 7 | 1.0 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 7 | 1.0 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 7 | 1.0 |
| (1,999) | 1:A:20:LYS:HD2 | 1:A:20:LYS:H | 7 | 0.99 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 3 | 0.99 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 13 | 0.99 |
| (1,1866) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HB2 | 11 | 0.99 |
| (1,1866) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HB2 | 14 | 0.99 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 8 | 0.99 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 8 | 0.99 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 8 | 0.99 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 9 | 0.98 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 9 | 0.98 |
| (1,999) | 1:A:20:LYS:HD2 | 1:A:20:LYS:H | 10 | 0.98 |
| (1,839) | 1:A:76:LYS:HB3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 12 | 0.98 |
| (1,839) | 1:A:76:LYS:HB3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 12 | 0.98 |
| (1,839) | 1:A:76:LYS:HB3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 12 | 0.98 |
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 10 | 0.98 |
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 16 | 0.98 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 18 | 0.98 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD22 | 17 | 0.98 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD21 | 17 | 0.98 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HD23 | 17 | 0.98 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD22 | 17 | 0.98 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD21 | 17 | 0.98 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HD23 | 17 | 0.98 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD22 | 17 | 0.98 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD21 | 17 | 0.98 |
| (1,2294) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HD23 | 17 | 0.98 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 18 | 0.98 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 14 | 0.98 |
| (1,1394) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:147:HIS:HB2 | 7 | 0.98 |
| (1,785) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HG2 | 14 | 0.97 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 8 | 0.97 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 7 | 0.97 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 7 | 0.97 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 7 | 0.97 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 7 | 0.97 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 7 | 0.97 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 7 | 0.97 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 7 | 0.97 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 7 | 0.97 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 7 | 0.97 |
| (1,2158) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 7 | 0.97 |
| (1,1908) | 1:A:70:VAL:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 5 | 0.97 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 11 | 0.97 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 11 | 0.97 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 11 | 0.97 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 18 | 0.97 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 18 | 0.97 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 18 | 0.97 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 4 | 0.97 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 4 | 0.97 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 4 | 0.97 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 18 | 0.97 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 18 | 0.97 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 18 | 0.97 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 20 | 0.97 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 20 | 0.97 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 20 | 0.97 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 19 | 0.96 |
| (2,128) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 19 | 0.96 |
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 14 | 0.96 |
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 19 | 0.96 |
| (1,539) | 1:A:113:ASN:HA | 1:A:81:LYS:HG2 | 12 | 0.96 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 2 | 0.96 |
| (1,338) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:51:ALA:HB2 | 19 | 0.96 |
| (1,338) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:51:ALA:HB1 | 19 | 0.96 |
| (1,338) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:51:ALA:HB3 | 19 | 0.96 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 4 | 0.96 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 12 | 0.96 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 5 | 0.96 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 16 | 0.96 |
| (1,1598) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HG3 | 7 | 0.96 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 6 | 0.96 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 6 | 0.96 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 6 | 0.96 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1074) | 1:A:76:LYS:HG3 | 1:A:77:ILE:H | 20 | 0.96 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 1 | 0.95 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 1 | 0.95 |
| (1,785) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HG2 | 16 | 0.95 |
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 8 | 0.95 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 4 | 0.95 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 13 | 0.95 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 11 | 0.95 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 11 | 0.95 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 11 | 0.95 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 11 | 0.95 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 11 | 0.95 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 11 | 0.95 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 11 | 0.95 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 11 | 0.95 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 11 | 0.95 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 17 | 0.95 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 17 | 0.95 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 17 | 0.95 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 17 | 0.95 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 17 | 0.95 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 17 | 0.95 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 17 | 0.95 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 17 | 0.95 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 17 | 0.95 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 20 | 0.95 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 19 | 0.95 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 17 | 0.95 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 17 | 0.95 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 17 | 0.95 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 4 | 0.95 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 4 | 0.95 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 4 | 0.95 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 11 | 0.95 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 11 | 0.95 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 11 | 0.95 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 12 | 0.95 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 12 | 0.95 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 12 | 0.95 |
| (1,545) | 1:A:81:LYS:HA | 1:A:81:LYS:HG3 | 12 | 0.94 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 6 | 0.94 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 6 | 0.94 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 6 | 0.94 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 6 | 0.94 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 6 | 0.94 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 6 | 0.94 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 6 | 0.94 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 6 | 0.94 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 6 | 0.94 |
| (1,2223) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:81:LYS:HG3 | 2 | 0.94 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 6 | 0.94 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 8 | 0.94 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 6 | 0.94 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 17 | 0.94 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 4 | 0.94 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 4 | 0.94 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 4 | 0.94 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 7 | 0.94 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 7 | 0.94 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 7 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 1 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 1 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 1 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 2 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 2 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 2 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 3 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 3 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 3 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 5 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 5 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 5 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 6 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 6 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 6 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 7 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 7 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 7 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 8 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 8 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 8 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 9 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 9 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 9 | 0.94 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 10 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 10 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 10 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 11 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 11 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 11 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 12 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 12 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 12 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 13 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 13 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 13 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 14 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 14 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 14 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 15 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 15 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 15 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 16 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 16 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 16 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 17 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 17 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 17 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 18 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 18 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 18 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 19 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 19 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 19 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD22 | 20 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD21 | 20 | 0.94 |
| (1,1360) | 1:A:14:LEU:HB2 | 1:A:14:LEU:HD23 | 20 | 0.94 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 19 | 0.94 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 19 | 0.94 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 19 | 0.94 |
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 4 | 0.93 |
| (1,785) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HG2 | 18 | 0.93 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 9 | 0.93 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 19 | 0.93 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 19 | 0.93 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 19 | 0.93 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 19 | 0.93 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 19 | 0.93 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 19 | 0.93 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 19 | 0.93 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 19 | 0.93 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 19 | 0.93 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 10 | 0.93 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 12 | 0.93 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 19 | 0.93 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 10 | 0.93 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 19 | 0.93 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 9 | 0.93 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 9 | 0.93 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 9 | 0.93 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 3 | 0.93 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 3 | 0.93 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 3 | 0.93 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 9 | 0.92 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 9 | 0.92 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 2 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 5 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 5 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 5 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 5 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 5 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 5 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 5 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 5 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 5 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 9 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 9 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 9 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 9 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 9 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 9 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 9 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 9 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 9 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 10 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 10 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 10 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 10 | 0.92 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 10 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 10 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 10 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 10 | 0.92 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 10 | 0.92 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 7 | 0.92 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 11 | 0.92 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 7 | 0.92 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 17 | 0.92 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 15 | 0.92 |
| (1,1598) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HG3 | 18 | 0.92 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 7 | 0.92 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 7 | 0.92 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 7 | 0.92 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 18 | 0.92 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 18 | 0.92 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 18 | 0.92 |
| (1,1074) | 1:A:76:LYS:HG3 | 1:A:77:ILE:H | 12 | 0.92 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 18 | 0.91 |
| (1,875) | 1:A:70:VAL:HA | 1:A:73:MET:HG2 | 19 | 0.91 |
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 7 | 0.91 |
| (1,785) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HG2 | 17 | 0.91 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 7 | 0.91 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 12 | 0.91 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 12 | 0.91 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 12 | 0.91 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 12 | 0.91 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 12 | 0.91 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 12 | 0.91 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 12 | 0.91 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 12 | 0.91 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 12 | 0.91 |
| (1,2287) | 1:A:17:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HG12 | 4 | 0.91 |
| (1,2287) | 1:A:17:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HG11 | 4 | 0.91 |
| (1,2287) | 1:A:17:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HG13 | 4 | 0.91 |
| (1,2287) | 1:A:17:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HG12 | 4 | 0.91 |
| (1,2287) | 1:A:17:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HG11 | 4 | 0.91 |
| (1,2287) | 1:A:17:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HG13 | 4 | 0.91 |
| (1,2287) | 1:A:17:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HG12 | 4 | 0.91 |
| (1,2287) | 1:A:17:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HG11 | 4 | 0.91 |
| (1,2287) | 1:A:17:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HG13 | 4 | 0.91 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 19 | 0.91 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 14 | 0.91 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 18 | 0.91 |
| (1,2006) | 1:A:127:SER:H | 1:A:127:SER:HB3 | 8 | 0.91 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 12 | 0.91 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 12 | 0.91 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 12 | 0.91 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:123:PHE:HD2 | 11 | 0.91 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:123:PHE:HD2 | 11 | 0.91 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:123:PHE:HD2 | 11 | 0.91 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 10 | 0.91 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 10 | 0.91 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 10 | 0.91 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 12 | 0.91 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 12 | 0.91 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 12 | 0.91 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 9 | 0.91 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 9 | 0.91 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 9 | 0.91 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 14 | 0.9 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 14 | 0.9 |
| (1,788) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:49:GLN:HE21 | 20 | 0.9 |
| (1,568) | 1:A:72:ASN:HA | 1:A:88:GLU:HB3 | 5 | 0.9 |
| (1,331) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:104:ASN:HB3 | 14 | 0.9 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 1 | 0.9 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 1 | 0.9 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 1 | 0.9 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 1 | 0.9 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 1 | 0.9 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 1 | 0.9 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 1 | 0.9 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 1 | 0.9 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 1 | 0.9 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 1 | 0.9 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 5 | 0.9 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 4 | 0.9 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 8 | 0.9 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 12 | 0.9 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 17 | 0.9 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 17 | 0.9 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 17 | 0.9 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 4 | 0.9 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 4 | 0.9 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 4 | 0.9 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 8 | 0.89 |
| (1,785) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HG2 | 2 | 0.89 |
| (1,785) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HG2 | 13 | 0.89 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 12 | 0.89 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 14 | 0.89 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 14 | 0.89 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 14 | 0.89 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 14 | 0.89 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 14 | 0.89 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 14 | 0.89 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 14 | 0.89 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 14 | 0.89 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 14 | 0.89 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 18 | 0.89 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 18 | 0.89 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 18 | 0.89 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 18 | 0.89 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 18 | 0.89 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 18 | 0.89 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 18 | 0.89 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 18 | 0.89 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 18 | 0.89 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 5 | 0.89 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 13 | 0.89 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 18 | 0.89 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 11 | 0.89 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 9 | 0.89 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 11 | 0.89 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 11 | 0.89 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 11 | 0.89 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 7 | 0.89 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 7 | 0.89 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 7 | 0.89 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 3 | 0.89 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 3 | 0.89 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 3 | 0.89 |
| (2,268) | 1:A:16:GLN:HG2 | 1:A:15:LYS:HG3 | 20 | 0.88 |
| (2,268) | 1:A:16:GLN:HG2 | 1:A:15:LYS:HG2 | 20 | 0.88 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 14 | 0.88 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 14 | 0.88 |
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 12 | 0.88 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 15 | 0.88 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 1 | 0.88 |
| (1,235) | 1:A:139:PHE:HZ | 1:A:138:ILE:HG12 | 9 | 0.88 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 4 | 0.88 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 13 | 0.88 |
| (1,2006) | 1:A:127:SER:H | 1:A:127:SER:HB3 | 15 | 0.88 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 13 | 0.88 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 1 | 0.88 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 1 | 0.88 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 1 | 0.88 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 1 | 0.88 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 1 | 0.88 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 1 | 0.88 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 4 | 0.87 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 4 | 0.87 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 4 | 0.87 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 4 | 0.87 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 4 | 0.87 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 4 | 0.87 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 0.87 |
| (1,785) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HG2 | 15 | 0.87 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 2 | 0.87 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 2 | 0.87 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 14 | 0.87 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 7 | 0.87 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 11 | 0.87 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 17 | 0.87 |
| (1,2006) | 1:A:127:SER:H | 1:A:127:SER:HB3 | 18 | 0.87 |
| (1,1857) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 1 | 0.87 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 9 | 0.87 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 9 | 0.87 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 9 | 0.87 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 9 | 0.87 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 10 | 0.87 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 10 | 0.87 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 10 | 0.87 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 4 | 0.86 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 4 | 0.86 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 6 | 0.86 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 11 | 0.86 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 13 | 0.86 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 16 | 0.86 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 3 | 0.86 |
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 11 | 0.86 |
| (1,785) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HG2 | 20 | 0.86 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 4 | 0.86 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 5 | 0.86 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 11 | 0.86 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 14 | 0.86 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 16 | 0.86 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 17 | 0.86 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 19 | 0.86 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 1 | 0.86 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 14 | 0.86 |
| (1,520) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HG2 | 16 | 0.86 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 20 | 0.86 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 12 | 0.86 |
| (1,331) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:104:ASN:HB3 | 20 | 0.86 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 15 | 0.86 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 15 | 0.86 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 15 | 0.86 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 15 | 0.86 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 15 | 0.86 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 15 | 0.86 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 15 | 0.86 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 15 | 0.86 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 15 | 0.86 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 2 | 0.86 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 16 | 0.86 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 2 | 0.86 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 18 | 0.86 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 2 | 0.86 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 2 | 0.86 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 2 | 0.86 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 8 | 0.86 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 8 | 0.86 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 8 | 0.86 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 16 | 0.86 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 16 | 0.86 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 16 | 0.86 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 2 | 0.86 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 2 | 0.86 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 2 | 0.86 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 3 | 0.85 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,785) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HG2 | 8 | 0.85 |
| (1,785) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HG2 | 11 | 0.85 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 1 | 0.85 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 12 | 0.85 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 13 | 0.85 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 15 | 0.85 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 20 | 0.85 |
| (1,532) | 1:A:135:LEU:HA | 1:A:135:LEU:HD12 | 18 | 0.85 |
| (1,532) | 1:A:135:LEU:HA | 1:A:135:LEU:HD11 | 18 | 0.85 |
| (1,532) | 1:A:135:LEU:HA | 1:A:135:LEU:HD13 | 18 | 0.85 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 8 | 0.85 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 16 | 0.85 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 4 | 0.85 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 8 | 0.85 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 1 | 0.85 |
| (1,2028) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HG3 | 6 | 0.85 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 5 | 0.85 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 6 | 0.85 |
| (1,1857) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 4 | 0.85 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 15 | 0.85 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 15 | 0.85 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 15 | 0.85 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 1 | 0.85 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 2 | 0.84 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 5 | 0.84 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 10 | 0.84 |
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 9 | 0.84 |
| (1,795) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:124:GLU:HG3 | 9 | 0.84 |
| (1,785) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HG2 | 1 | 0.84 |
| (1,785) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HG2 | 3 | 0.84 |
| (1,785) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HG2 | 4 | 0.84 |
| (1,785) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HG2 | 10 | 0.84 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 2 | 0.84 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 6 | 0.84 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 14 | 0.84 |
| (1,683) | 1:A:34:ASP:HB3 | 1:A:35:GLU:HG2 | 3 | 0.84 |
| (1,545) | 1:A:81:LYS:HA | 1:A:81:LYS:HG3 | 16 | 0.84 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 12 | 0.84 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 15 | 0.84 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 16 | 0.84 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 17 | 0.84 |
| (1,1815) | 1:A:81:LYS:H | 1:A:81:LYS:HG3 | 2 | 0.84 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 2 | 0.84 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 4 | 0.84 |
| (1,1532) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 10 | 0.84 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 14 | 0.84 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 14 | 0.84 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 14 | 0.84 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 4 | 0.84 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 4 | 0.84 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 4 | 0.84 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 18 | 0.83 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 18 | 0.83 |
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 17 | 0.83 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 7 | 0.83 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 18 | 0.83 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 1 | 0.83 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 10 | 0.83 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 11 | 0.83 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 19 | 0.83 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 5 | 0.83 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 19 | 0.83 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 6 | 0.83 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 10 | 0.83 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 16 | 0.83 |
| (1,235) | 1:A:139:PHE:HZ | 1:A:138:ILE:HG12 | 16 | 0.83 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 2 | 0.83 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 2 | 0.83 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 2 | 0.83 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 2 | 0.83 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 2 | 0.83 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 2 | 0.83 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 2 | 0.83 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 2 | 0.83 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 2 | 0.83 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 11 | 0.83 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 20 | 0.83 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 3 | 0.83 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 9 | 0.83 |
| (1,211) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:82:VAL:HG22 | 1 | 0.83 |
| (1,211) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:82:VAL:HG21 | 1 | 0.83 |
| (1,211) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:82:VAL:HG23 | 1 | 0.83 |
| (1,1857) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 20 | 0.83 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 15 | 0.83 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 15 | 0.83 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 15 | 0.83 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 17 | 0.83 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 1 | 0.82 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 1 | 0.82 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 10 | 0.82 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 10 | 0.82 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 15 | 0.82 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 19 | 0.82 |
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 6 | 0.82 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 8 | 0.82 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 3 | 0.82 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 5 | 0.82 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 6 | 0.82 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 8 | 0.82 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 12 | 0.82 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 13 | 0.82 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 18 | 0.82 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 20 | 0.82 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 15 | 0.82 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 18 | 0.82 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 20 | 0.82 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 10 | 0.82 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 20 | 0.82 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 19 | 0.82 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 19 | 0.82 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 19 | 0.82 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 20 | 0.82 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 20 | 0.82 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 20 | 0.82 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 2 | 0.82 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 2 | 0.82 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 2 | 0.82 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 1 | 0.82 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 1 | 0.82 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 1 | 0.82 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 7 | 0.82 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 7 | 0.82 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 7 | 0.82 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 19 | 0.82 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 19 | 0.82 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 19 | 0.82 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 5 | 0.82 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 5 | 0.82 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 5 | 0.82 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 14 | 0.82 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 14 | 0.82 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 14 | 0.82 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 2 | 0.81 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 2 | 0.81 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 9 | 0.81 |
| (1,785) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HG2 | 7 | 0.81 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 15 | 0.81 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 16 | 0.81 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 17 | 0.81 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 13 | 0.81 |
| (1,331) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:104:ASN:HB3 | 4 | 0.81 |
| (1,331) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:104:ASN:HB3 | 9 | 0.81 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 15 | 0.81 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 20 | 0.81 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 3 | 0.81 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 13 | 0.81 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 15 | 0.81 |
| (1,1638) | 1:A:118:VAL:H | 1:A:118:VAL:HG22 | 11 | 0.81 |
| (1,1638) | 1:A:118:VAL:H | 1:A:118:VAL:HG21 | 11 | 0.81 |
| (1,1638) | 1:A:118:VAL:H | 1:A:118:VAL:HG23 | 11 | 0.81 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 19 | 0.81 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 19 | 0.81 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 19 | 0.81 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 4 | 0.8 |
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 1 | 0.8 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 2 | 0.8 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 7 | 0.8 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 19 | 0.8 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 20 | 0.8 |
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 1 | 0.8 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 5 | 0.8 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 13 | 0.8 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 10 | 0.8 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 7 | 0.8 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 15 | 0.8 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 20 | 0.8 |
| (1,520) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HG2 | 11 | 0.8 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 13 | 0.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 8 | 0.8 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 17 | 0.8 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 17 | 0.8 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 4 | 0.8 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.8 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.8 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.8 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 19 | 0.8 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 19 | 0.8 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 19 | 0.8 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 20 | 0.8 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 15 | 0.8 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 4 | 0.8 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 4 | 0.8 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 4 | 0.8 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 2 | 0.8 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 2 | 0.8 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 2 | 0.8 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 1 | 0.8 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 1 | 0.8 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 1 | 0.8 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 13 | 0.8 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 13 | 0.8 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 13 | 0.8 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:30:ASP:HB2 | 16 | 0.8 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:30:ASP:HB2 | 16 | 0.8 |
| (1,1130) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:30:ASP:HB2 | 16 | 0.8 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 20 | 0.79 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 20 | 0.79 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 3 | 0.79 |
| (1,727) | 1:A:5:TYR:HB3 | 1:A:5:TYR:HD1 | 9 | 0.79 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 2 | 0.79 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 4 | 0.79 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 20 | 0.79 |
| (1,545) | 1:A:81:LYS:HA | 1:A:81:LYS:HG3 | 2 | 0.79 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 14 | 0.79 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 16 | 0.79 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 16 | 0.79 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 16 | 0.79 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 16 | 0.79 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 16 | 0.79 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 16 | 0.79 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 16 | 0.79 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 16 | 0.79 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 16 | 0.79 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 18 | 0.79 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 13 | 0.79 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 13 | 0.79 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 13 | 0.79 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 18 | 0.79 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 20 | 0.79 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 8 | 0.78 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 8 | 0.78 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 18 | 0.78 |
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 2 | 0.78 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 8 | 0.78 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 9 | 0.78 |
| (1,7) | 1:A:123:PHE:HB3 | 1:A:123:PHE:HD2 | 9 | 0.78 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 18 | 0.78 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 8 | 0.78 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 17 | 0.78 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 5 | 0.78 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 6 | 0.78 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 19 | 0.78 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 12 | 0.78 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 8 | 0.78 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 2 | 0.78 |
| (1,1853) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:136:ASN:HB2 | 20 | 0.78 |
| (1,1394) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:147:HIS:HB2 | 16 | 0.78 |
| (1,1394) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:147:HIS:HB2 | 18 | 0.78 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 10 | 0.78 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 10 | 0.78 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 10 | 0.78 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 14 | 0.78 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 14 | 0.78 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 14 | 0.78 |
| (1,1242) | 1:A:111:ILE:HD12 | 1:A:16:GLN:HG3 | 20 | 0.78 |
| (1,1242) | 1:A:111:ILE:HD11 | 1:A:16:GLN:HG3 | 20 | 0.78 |
| (1,1242) | 1:A:111:ILE:HD13 | 1:A:16:GLN:HG3 | 20 | 0.78 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.78 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.78 |
| (1,1082) | 1:A:45:LYS:HG2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.78 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 11 | 0.78 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 1 | 0.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 12 | 0.77 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 14 | 0.77 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 18 | 0.77 |
| (1,795) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:124:GLU:HG3 | 1 | 0.77 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 10 | 0.77 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 3 | 0.77 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 6 | 0.77 |
| (1,493) | 1:A:7:SER:H | 1:A:6:PHE:HA | 10 | 0.77 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 19 | 0.77 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 20 | 0.77 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 2 | 0.77 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 8 | 0.77 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 11 | 0.77 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 12 | 0.77 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 13 | 0.77 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 16 | 0.77 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 18 | 0.77 |
| (1,331) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:104:ASN:HB3 | 17 | 0.77 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD12 | 4 | 0.77 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD11 | 4 | 0.77 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD22 | 1:A:21:LEU:HD13 | 4 | 0.77 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD12 | 4 | 0.77 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD11 | 4 | 0.77 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD21 | 1:A:21:LEU:HD13 | 4 | 0.77 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD12 | 4 | 0.77 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD11 | 4 | 0.77 |
| (1,2291) | 1:A:54:LEU:HD23 | 1:A:21:LEU:HD13 | 4 | 0.77 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 6 | 0.77 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 9 | 0.77 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 11 | 0.77 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 16 | 0.77 |
| (1,1394) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:147:HIS:HB2 | 8 | 0.77 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 5 | 0.77 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 5 | 0.77 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 5 | 0.77 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 6 | 0.77 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 6 | 0.77 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 6 | 0.77 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 3 | 0.77 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 3 | 0.77 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 3 | 0.77 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 4 | 0.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 4 | 0.77 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 4 | 0.77 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 12 | 0.77 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 12 | 0.77 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 12 | 0.77 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 17 | 0.77 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 17 | 0.77 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 17 | 0.77 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 6 | 0.77 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 16 | 0.76 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 16 | 0.76 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 17 | 0.76 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 17 | 0.76 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 4 | 0.76 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 4 | 0.76 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 4 | 0.76 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.76 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.76 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.76 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 19 | 0.76 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 7 | 0.76 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 11 | 0.76 |
| (1,50) | 1:A:146:TRP:HB2 | 1:A:146:TRP:HD1 | 15 | 0.76 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 9 | 0.76 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 1 | 0.76 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 3 | 0.76 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 4 | 0.76 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 7 | 0.76 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 9 | 0.76 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 10 | 0.76 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 14 | 0.76 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 15 | 0.76 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 17 | 0.76 |
| (1,372) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 20 | 0.76 |
| (1,2223) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:81:LYS:HG3 | 16 | 0.76 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 2 | 0.76 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.76 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.76 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.76 |
| (1,1853) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:136:ASN:HB2 | 6 | 0.76 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 11 | 0.76 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 3 | 0.76 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 3 | 0.76 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 3 | 0.76 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 9 | 0.76 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 9 | 0.76 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 9 | 0.76 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 15 | 0.76 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 15 | 0.76 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 15 | 0.76 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 9 | 0.75 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 9 | 0.75 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 9 | 0.75 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 9 | 0.75 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 9 | 0.75 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 9 | 0.75 |
| (1,825) | 1:A:49:GLN:HG2 | 1:A:54:LEU:HB3 | 20 | 0.75 |
| (1,795) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:124:GLU:HG3 | 3 | 0.75 |
| (1,795) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:124:GLU:HG3 | 7 | 0.75 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 3 | 0.75 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 10 | 0.75 |
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 9 | 0.75 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 2 | 0.75 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 13 | 0.75 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 9 | 0.75 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.75 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.75 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.75 |
| (1,1722) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:49:GLN:HE21 | 14 | 0.75 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 12 | 0.75 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 6 | 0.75 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 6 | 0.75 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 6 | 0.75 |
| (1,1167) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:65:ASP:HB3 | 2 | 0.75 |
| (1,1167) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:65:ASP:HB3 | 2 | 0.75 |
| (1,1167) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:65:ASP:HB3 | 2 | 0.75 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 5 | 0.75 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 5 | 0.75 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 5 | 0.75 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 6 | 0.75 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 6 | 0.75 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 6 | 0.75 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 11 | 0.75 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 11 | 0.75 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 11 | 0.75 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 14 | 0.75 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 14 | 0.75 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 14 | 0.75 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 16 | 0.75 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 16 | 0.75 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 16 | 0.75 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 13 | 0.75 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 13 | 0.75 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 13 | 0.75 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 16 | 0.75 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 16 | 0.75 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 16 | 0.75 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 2 | 0.75 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 4 | 0.74 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 4 | 0.74 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 16 | 0.74 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 16 | 0.74 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 16 | 0.74 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 16 | 0.74 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 16 | 0.74 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 16 | 0.74 |
| (1,762) | 1:A:106:ASN:HB3 | 1:A:85:PHE:HE1 | 19 | 0.74 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 9 | 0.74 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 10 | 0.74 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 12 | 0.74 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 17 | 0.74 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 1 | 0.74 |
| (1,545) | 1:A:81:LYS:HA | 1:A:81:LYS:HG3 | 4 | 0.74 |
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 2 | 0.74 |
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 4 | 0.74 |
| (1,331) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:104:ASN:HB3 | 5 | 0.74 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 16 | 0.74 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 3 | 0.74 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 18 | 0.74 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 1 | 0.74 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 7 | 0.74 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 7 | 0.74 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 7 | 0.74 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 7 | 0.74 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 8 | 0.74 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 8 | 0.74 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 8 | 0.74 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 18 | 0.74 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 18 | 0.74 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 18 | 0.74 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 20 | 0.74 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 20 | 0.74 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 20 | 0.74 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 14 | 0.73 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 14 | 0.73 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 14 | 0.73 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 14 | 0.73 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 14 | 0.73 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 14 | 0.73 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 19 | 0.73 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 19 | 0.73 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 19 | 0.73 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 19 | 0.73 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 19 | 0.73 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 19 | 0.73 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 7 | 0.73 |
| (1,96) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 17 | 0.73 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 4 | 0.73 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 5 | 0.73 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 6 | 0.73 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 8 | 0.73 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 11 | 0.73 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 14 | 0.73 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD12 | 20 | 0.73 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD11 | 20 | 0.73 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD13 | 20 | 0.73 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 17 | 0.73 |
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 3 | 0.73 |
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 17 | 0.73 |
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 20 | 0.73 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 13 | 0.73 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 1 | 0.73 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 2 | 0.73 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 14 | 0.73 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 14 | 0.73 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 19 | 0.73 |
| (1,1729) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 17 | 0.73 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 10 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 10 | 0.73 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 10 | 0.73 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 8 | 0.73 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 8 | 0.73 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 8 | 0.73 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 4 | 0.73 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 7 | 0.73 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 11 | 0.72 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 11 | 0.72 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 11 | 0.72 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 11 | 0.72 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 11 | 0.72 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 11 | 0.72 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 3 | 0.72 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 3 | 0.72 |
| (2,415) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:82:VAL:HG12 | 11 | 0.72 |
| (2,415) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:82:VAL:HG11 | 11 | 0.72 |
| (2,415) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:82:VAL:HG13 | 11 | 0.72 |
| (2,415) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:114:VAL:HG12 | 11 | 0.72 |
| (2,415) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:114:VAL:HG11 | 11 | 0.72 |
| (2,415) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:114:VAL:HG13 | 11 | 0.72 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 8 | 0.72 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 8 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 3 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 3 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 3 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 3 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 3 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 3 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 10 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 10 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 10 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 10 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 10 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 10 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 17 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 17 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 17 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 17 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 17 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 17 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 18 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 18 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 18 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 18 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 18 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 18 | 0.72 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 5 | 0.72 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 5 | 0.72 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 5 | 0.72 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.72 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.72 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.72 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 7 | 0.72 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 7 | 0.72 |
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 8 | 0.72 |
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 15 | 0.72 |
| (1,331) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:104:ASN:HB3 | 19 | 0.72 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 5 | 0.72 |
| (1,2183) | 1:A:40:GLY:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 15 | 0.72 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 10 | 0.72 |
| (1,1729) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 10 | 0.72 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 3 | 0.72 |
| (1,1599) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HB3 | 11 | 0.72 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 14 | 0.72 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 16 | 0.72 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 4 | 0.71 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 4 | 0.71 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 20 | 0.71 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 20 | 0.71 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 20 | 0.71 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 20 | 0.71 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 20 | 0.71 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 20 | 0.71 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 20 | 0.71 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 20 | 0.71 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 20 | 0.71 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 10 | 0.71 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 10 | 0.71 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 8 | 0.71 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 16 | 0.71 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 16 | 0.71 |
| (1,520) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HG2 | 14 | 0.71 |
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 5 | 0.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 6 | 0.71 |
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 18 | 0.71 |
| (1,331) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:104:ASN:HB3 | 7 | 0.71 |
| (1,331) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:104:ASN:HB3 | 16 | 0.71 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 17 | 0.71 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 7 | 0.71 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 9 | 0.71 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.71 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.71 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.71 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 9 | 0.71 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 15 | 0.71 |
| (1,1991) | 1:A:106:ASN:H | 1:A:106:ASN:HB3 | 5 | 0.71 |
| (1,1991) | 1:A:106:ASN:H | 1:A:106:ASN:HB3 | 7 | 0.71 |
| (1,1234) | 1:A:35:GLU:HG3 | 1:A:23:ILE:HD12 | 20 | 0.71 |
| (1,1234) | 1:A:35:GLU:HG3 | 1:A:23:ILE:HD11 | 20 | 0.71 |
| (1,1234) | 1:A:35:GLU:HG3 | 1:A:23:ILE:HD13 | 20 | 0.71 |
| (1,1201) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:73:MET:HG2 | 19 | 0.71 |
| (1,1201) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:73:MET:HG2 | 19 | 0.71 |
| (1,1201) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:73:MET:HG2 | 19 | 0.71 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 2 | 0.71 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 2 | 0.71 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 2 | 0.71 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 4 | 0.71 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 16 | 0.71 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 16 | 0.71 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 16 | 0.71 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 2 | 0.7 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 2 | 0.7 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 2 | 0.7 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 2 | 0.7 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 2 | 0.7 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 2 | 0.7 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 5 | 0.7 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 5 | 0.7 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 5 | 0.7 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 5 | 0.7 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 5 | 0.7 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 5 | 0.7 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 18 | 0.7 |
| (1,539) | 1:A:113:ASN:HA | 1:A:81:LYS:HG2 | 2 | 0.7 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 11 | 0.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 7 | 0.7 |
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 11 | 0.7 |
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 13 | 0.7 |
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 16 | 0.7 |
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 19 | 0.7 |
| (1,331) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:104:ASN:HB3 | 11 | 0.7 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 1 | 0.7 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 14 | 0.7 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 18 | 0.7 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 10 | 0.7 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 1 | 0.7 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 17 | 0.7 |
| (1,2096) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 9 | 0.7 |
| (1,2096) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 9 | 0.7 |
| (1,2096) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 9 | 0.7 |
| (1,1815) | 1:A:81:LYS:H | 1:A:81:LYS:HG3 | 16 | 0.7 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 14 | 0.7 |
| (1,1394) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:147:HIS:HB2 | 4 | 0.7 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 19 | 0.7 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 19 | 0.7 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 19 | 0.7 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 1 | 0.69 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 1 | 0.69 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 5 | 0.69 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 5 | 0.69 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 7 | 0.69 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 7 | 0.69 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 7 | 0.69 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 7 | 0.69 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 7 | 0.69 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 7 | 0.69 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 7 | 0.69 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 7 | 0.69 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 12 | 0.69 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 12 | 0.69 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 12 | 0.69 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 12 | 0.69 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 12 | 0.69 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 12 | 0.69 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 15 | 0.69 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 15 | 0.69 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 15 | 0.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 15 | 0.69 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 15 | 0.69 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 15 | 0.69 |
| (2,268) | 1:A:16:GLN:HG2 | 1:A:15:LYS:HG3 | 8 | 0.69 |
| (2,268) | 1:A:16:GLN:HG2 | 1:A:15:LYS:HG2 | 8 | 0.69 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 18 | 0.69 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 18 | 0.69 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 2 | 0.69 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 13 | 0.69 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 4 | 0.69 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 12 | 0.69 |
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 1 | 0.69 |
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 10 | 0.69 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 1 | 0.69 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 15 | 0.69 |
| (1,354) | 1:A:11:SER:HB3 | 1:A:11:SER:HA | 2 | 0.69 |
| (1,354) | 1:A:11:SER:HB3 | 1:A:11:SER:HA | 3 | 0.69 |
| (1,354) | 1:A:11:SER:HB3 | 1:A:11:SER:HA | 4 | 0.69 |
| (1,354) | 1:A:11:SER:HB3 | 1:A:11:SER:HA | 18 | 0.69 |
| (1,354) | 1:A:11:SER:HB3 | 1:A:11:SER:HA | 19 | 0.69 |
| (1,354) | 1:A:11:SER:HB3 | 1:A:11:SER:HA | 20 | 0.69 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 4 | 0.69 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 8 | 0.69 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 12 | 0.69 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 15 | 0.69 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 14 | 0.69 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 16 | 0.69 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 18 | 0.69 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 3 | 0.69 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 15 | 0.69 |
| (1,1904) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HG2 | 16 | 0.69 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 16 | 0.69 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 3 | 0.69 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 18 | 0.69 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 1 | 0.69 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 1 | 0.69 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 1 | 0.69 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 20 | 0.69 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 20 | 0.69 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 20 | 0.69 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 3 | 0.69 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 8 | 0.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 13 | 0.69 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 19 | 0.68 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 19 | 0.68 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 19 | 0.68 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 19 | 0.68 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 19 | 0.68 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 19 | 0.68 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 1 | 0.68 |
| (1,762) | 1:A:106:ASN:HB3 | 1:A:85:PHE:HE1 | 14 | 0.68 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 18 | 0.68 |
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 12 | 0.68 |
| (1,354) | 1:A:11:SER:HB3 | 1:A:11:SER:HA | 10 | 0.68 |
| (1,331) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:104:ASN:HB3 | 12 | 0.68 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 3 | 0.68 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 7 | 0.68 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 11 | 0.68 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 13 | 0.68 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 13 | 0.68 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 5 | 0.68 |
| (1,2029) | 1:A:97:SER:H | 1:A:98:ILE:HG13 | 8 | 0.68 |
| (1,1814) | 1:A:81:LYS:H | 1:A:81:LYS:HB2 | 12 | 0.68 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 2 | 0.68 |
| (1,1729) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 7 | 0.68 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 20 | 0.68 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 8 | 0.68 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 11 | 0.68 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 14 | 0.68 |
| (1,1532) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 12 | 0.68 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 10 | 0.68 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 15 | 0.68 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 2 | 0.67 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 2 | 0.67 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 6 | 0.67 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 6 | 0.67 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 6 | 0.67 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 6 | 0.67 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 6 | 0.67 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 6 | 0.67 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 13 | 0.67 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 13 | 0.67 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 2 | 0.67 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 6 | 0.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 19 | 0.67 |
| (1,4) | 1:A:123:PHE:HB2 | 1:A:123:PHE:HD1 | 14 | 0.67 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 2 | 0.67 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 11 | 0.67 |
| (1,1904) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HG2 | 19 | 0.67 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 1 | 0.67 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 1 | 0.67 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 3 | 0.67 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 6 | 0.67 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 9 | 0.67 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 13 | 0.67 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 18 | 0.67 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 19 | 0.67 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 20 | 0.67 |
| (1,1532) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 13 | 0.67 |
| (1,1421) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:144:ILE:HG12 | 5 | 0.67 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 15 | 0.67 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 15 | 0.67 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 15 | 0.67 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 13 | 0.67 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 13 | 0.67 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 13 | 0.67 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 16 | 0.67 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 16 | 0.67 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 16 | 0.67 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 10 | 0.67 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 17 | 0.67 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:72:ASN:HD21 | 19 | 0.67 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:72:ASN:HD21 | 19 | 0.67 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:72:ASN:HD21 | 19 | 0.67 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 10 | 0.66 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 10 | 0.66 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 15 | 0.66 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 15 | 0.66 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 9 | 0.66 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 9 | 0.66 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 1 | 0.66 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 1 | 0.66 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 1 | 0.66 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 1 | 0.66 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 1 | 0.66 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 1 | 0.66 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 11 | 0.66 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 11 | 0.66 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 11 | 0.66 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 11 | 0.66 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 11 | 0.66 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 11 | 0.66 |
| (2,164) | 1:A:131:SER:HB3 | 1:A:131:SER:H | 18 | 0.66 |
| (2,164) | 1:A:127:SER:H | 1:A:127:SER:HB3 | 18 | 0.66 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 14 | 0.66 |
| (1,573) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:47:LYS:HG3 | 15 | 0.66 |
| (1,387) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:65:ASP:HB3 | 3 | 0.66 |
| (1,387) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:65:ASP:HB3 | 5 | 0.66 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 5 | 0.66 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 20 | 0.66 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 16 | 0.66 |
| (1,2006) | 1:A:127:SER:H | 1:A:127:SER:HB3 | 4 | 0.66 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 5 | 0.66 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 6 | 0.66 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 8 | 0.66 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 16 | 0.66 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 2 | 0.66 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 5 | 0.66 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 7 | 0.66 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 10 | 0.66 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 12 | 0.66 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 15 | 0.66 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 16 | 0.66 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 17 | 0.66 |
| (1,1395) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:148:GLU:HB2 | 9 | 0.66 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:46:ILE:HG12 | 18 | 0.66 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:46:ILE:HG12 | 18 | 0.66 |
| (1,1377) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:46:ILE:HG12 | 18 | 0.66 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 3 | 0.66 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 3 | 0.66 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 3 | 0.66 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 9 | 0.66 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 9 | 0.66 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 9 | 0.66 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 20 | 0.66 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 20 | 0.66 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 20 | 0.66 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 2 | 0.66 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 17 | 0.66 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 17 | 0.66 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 17 | 0.66 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 20 | 0.65 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 20 | 0.65 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 13 | 0.65 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 13 | 0.65 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 13 | 0.65 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 13 | 0.65 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 13 | 0.65 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 13 | 0.65 |
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 16 | 0.65 |
| (1,405) | 1:A:108:PHE:HA | 1:A:59:LEU:HD22 | 9 | 0.65 |
| (1,405) | 1:A:108:PHE:HA | 1:A:59:LEU:HD21 | 9 | 0.65 |
| (1,405) | 1:A:108:PHE:HA | 1:A:59:LEU:HD23 | 9 | 0.65 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 11 | 0.65 |
| (1,331) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:104:ASN:HB3 | 3 | 0.65 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 19 | 0.65 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 15 | 0.65 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 10 | 0.65 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 13 | 0.65 |
| (1,1904) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HG2 | 14 | 0.65 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 18 | 0.65 |
| (1,1722) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:49:GLN:HE21 | 10 | 0.65 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 7 | 0.65 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 10 | 0.65 |
| (1,1671) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HB2 | 18 | 0.65 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 6 | 0.65 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 16 | 0.65 |
| (1,1602) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:14:LEU:HB3 | 4 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 1 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 1 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 1 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 4 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 4 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 4 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 5 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 5 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 5 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 6 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 6 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 6 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 7 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 7 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 7 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 8 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 8 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 8 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 10 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 10 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 10 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 11 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 11 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 11 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 12 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 12 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 12 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 13 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 13 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 13 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 14 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 14 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 14 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 15 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 15 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 15 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 16 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 16 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 16 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 17 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 17 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 17 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 18 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 18 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 18 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 19 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 19 | 0.65 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 19 | 0.65 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 15 | 0.65 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 18 | 0.64 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 18 | 0.64 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 20 | 0.64 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 20 | 0.64 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 20 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 20 | 0.64 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 20 | 0.64 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 20 | 0.64 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 9 | 0.64 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 9 | 0.64 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 9 | 0.64 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 9 | 0.64 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 9 | 0.64 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 9 | 0.64 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 3 | 0.64 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 3 | 0.64 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 15 | 0.64 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 15 | 0.64 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 15 | 0.64 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 15 | 0.64 |
| (1,380) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:H | 6 | 0.64 |
| (1,331) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:104:ASN:HB3 | 2 | 0.64 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 9 | 0.64 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 9 | 0.64 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 9 | 0.64 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 9 | 0.64 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 9 | 0.64 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 9 | 0.64 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 9 | 0.64 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 9 | 0.64 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 9 | 0.64 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 6 | 0.64 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 12 | 0.64 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 17 | 0.64 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 10 | 0.64 |
| (1,2113) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:82:VAL:HB | 12 | 0.64 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 12 | 0.64 |
| (1,1904) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HG2 | 11 | 0.64 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.64 |
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 17 | 0.64 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 7 | 0.64 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 11 | 0.64 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 12 | 0.64 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 17 | 0.64 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 19 | 0.64 |
| (1,1599) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HB3 | 19 | 0.64 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 12 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 12 | 0.64 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 12 | 0.64 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG22 | 2 | 0.64 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG21 | 2 | 0.64 |
| (1,1296) | 1:A:46:ILE:HG12 | 1:A:46:ILE:HG23 | 2 | 0.64 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 13 | 0.64 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 13 | 0.64 |
| (1,1150) | 1:A:21:LEU:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 13 | 0.64 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 5 | 0.64 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 9 | 0.64 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 6 | 0.63 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 6 | 0.63 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 8 | 0.63 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 8 | 0.63 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 12 | 0.63 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 12 | 0.63 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 3 | 0.63 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 3 | 0.63 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 3 | 0.63 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 3 | 0.63 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 3 | 0.63 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 3 | 0.63 |
| (1,795) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:124:GLU:HG3 | 5 | 0.63 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 17 | 0.63 |
| (1,55) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:46:ILE:HG12 | 9 | 0.63 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 10 | 0.63 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 20 | 0.63 |
| (1,380) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:H | 7 | 0.63 |
| (1,380) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:H | 12 | 0.63 |
| (1,380) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:H | 17 | 0.63 |
| (1,380) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:H | 19 | 0.63 |
| (1,331) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:104:ASN:HB3 | 8 | 0.63 |
| (1,2220) | 1:A:76:LYS:H | 1:A:82:VAL:HG22 | 11 | 0.63 |
| (1,2220) | 1:A:76:LYS:H | 1:A:82:VAL:HG21 | 11 | 0.63 |
| (1,2220) | 1:A:76:LYS:H | 1:A:82:VAL:HG23 | 11 | 0.63 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 10 | 0.63 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 6 | 0.63 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 14 | 0.63 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 19 | 0.63 |
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 1 | 0.63 |
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 2 | 0.63 |
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 3 | 0.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 5 | 0.63 |
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 7 | 0.63 |
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 9 | 0.63 |
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 10 | 0.63 |
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 11 | 0.63 |
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 15 | 0.63 |
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 16 | 0.63 |
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 18 | 0.63 |
| (1,1395) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:148:GLU:HB2 | 13 | 0.63 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 5 | 0.63 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 5 | 0.63 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 5 | 0.63 |
| (1,1242) | 1:A:111:ILE:HD12 | 1:A:16:GLN:HG3 | 8 | 0.63 |
| (1,1242) | 1:A:111:ILE:HD11 | 1:A:16:GLN:HG3 | 8 | 0.63 |
| (1,1242) | 1:A:111:ILE:HD13 | 1:A:16:GLN:HG3 | 8 | 0.63 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 11 | 0.62 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 11 | 0.62 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 3 | 0.62 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 3 | 0.62 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 3 | 0.62 |
| (2,415) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:82:VAL:HG12 | 1 | 0.62 |
| (2,415) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:82:VAL:HG11 | 1 | 0.62 |
| (2,415) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:82:VAL:HG13 | 1 | 0.62 |
| (2,415) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:114:VAL:HG12 | 1 | 0.62 |
| (2,415) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:114:VAL:HG11 | 1 | 0.62 |
| (2,415) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:114:VAL:HG13 | 1 | 0.62 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 3 | 0.62 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 3 | 0.62 |
| (2,268) | 1:A:16:GLN:HG2 | 1:A:15:LYS:HG3 | 6 | 0.62 |
| (2,268) | 1:A:16:GLN:HG2 | 1:A:15:LYS:HG2 | 6 | 0.62 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 2 | 0.62 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 2 | 0.62 |
| (2,219) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:16:GLN:HG2 | 20 | 0.62 |
| (2,219) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:16:GLN:HG3 | 20 | 0.62 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 8 | 0.62 |
| (1,795) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:124:GLU:HG3 | 19 | 0.62 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 4 | 0.62 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 5 | 0.62 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 12 | 0.62 |
| (1,762) | 1:A:106:ASN:HB3 | 1:A:85:PHE:HE1 | 6 | 0.62 |
| (1,380) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:H | 1 | 0.62 |
| (1,380) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:H | 4 | 0.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 4 | 0.62 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 8 | 0.62 |
| (1,2192) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HE22 | 19 | 0.62 |
| (1,2113) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:82:VAL:HB | 4 | 0.62 |
| (1,2113) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:82:VAL:HB | 5 | 0.62 |
| (1,2113) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:82:VAL:HB | 15 | 0.62 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 12 | 0.62 |
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 8 | 0.62 |
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 12 | 0.62 |
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 14 | 0.62 |
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 19 | 0.62 |
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 20 | 0.62 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 14 | 0.62 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 14 | 0.62 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 14 | 0.62 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 18 | 0.62 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 18 | 0.62 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 18 | 0.62 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 12 | 0.62 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 9 | 0.61 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 9 | 0.61 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 9 | 0.61 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 14 | 0.61 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 14 | 0.61 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:15:LYS:HB3 | 8 | 0.61 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 8 | 0.61 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:15:LYS:HB3 | 8 | 0.61 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG21 | 1:A:17:LEU:HB3 | 8 | 0.61 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG22 | 1:A:17:LEU:HB3 | 8 | 0.61 |
| (2,359) | 1:A:18:THR:HG23 | 1:A:17:LEU:HB3 | 8 | 0.61 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 4 | 0.61 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 4 | 0.61 |
| (1,331) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:104:ASN:HB3 | 13 | 0.61 |
| (1,235) | 1:A:139:PHE:HZ | 1:A:138:ILE:HG12 | 12 | 0.61 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 3 | 0.61 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 5 | 0.61 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 18 | 0.61 |
| (1,2113) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:82:VAL:HB | 19 | 0.61 |
| (1,2113) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:82:VAL:HB | 20 | 0.61 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 4 | 0.61 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 6 | 0.61 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 11 | 0.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 6 | 0.61 |
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 13 | 0.61 |
| (1,1532) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 14 | 0.61 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 5 | 0.61 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 6 | 0.6 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 6 | 0.6 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 12 | 0.6 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 12 | 0.6 |
| (1,965) | 1:A:47:LYS:HD2 | 1:A:44:ARG:HA | 3 | 0.6 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 16 | 0.6 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 19 | 0.6 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 20 | 0.6 |
| (1,808) | 1:A:145:GLU:HG3 | 1:A:145:GLU:HA | 5 | 0.6 |
| (1,800) | 1:A:145:GLU:HG3 | 1:A:145:GLU:HB2 | 11 | 0.6 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 9 | 0.6 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 17 | 0.6 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 11 | 0.6 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 14 | 0.6 |
| (1,2113) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:82:VAL:HB | 6 | 0.6 |
| (1,2113) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:82:VAL:HB | 14 | 0.6 |
| (1,2113) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:82:VAL:HB | 18 | 0.6 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 9 | 0.6 |
| (1,2004) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 4 | 0.6 |
| (1,1814) | 1:A:81:LYS:H | 1:A:81:LYS:HB2 | 4 | 0.6 |
| (1,1722) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:49:GLN:HE21 | 16 | 0.6 |
| (1,1532) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 11 | 0.6 |
| (1,1528) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:143:LYS:HB2 | 8 | 0.6 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 13 | 0.6 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 15 | 0.6 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 15 | 0.6 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 15 | 0.6 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:82:VAL:HG22 | 11 | 0.6 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:82:VAL:HG21 | 11 | 0.6 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:82:VAL:HG23 | 11 | 0.6 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:82:VAL:HG22 | 11 | 0.6 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:82:VAL:HG21 | 11 | 0.6 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:82:VAL:HG23 | 11 | 0.6 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:82:VAL:HG22 | 11 | 0.6 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:82:VAL:HG21 | 11 | 0.6 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:82:VAL:HG23 | 11 | 0.6 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 14 | 0.59 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 14 | 0.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 9 | 0.59 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 9 | 0.59 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 19 | 0.59 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 19 | 0.59 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 20 | 0.59 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 20 | 0.59 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 16 | 0.59 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 16 | 0.59 |
| (1,926) | 1:A:140:GLU:H | 1:A:140:GLU:HB2 | 13 | 0.59 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 5 | 0.59 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 6 | 0.59 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 7 | 0.59 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 12 | 0.59 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 15 | 0.59 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 7 | 0.59 |
| (1,539) | 1:A:113:ASN:HA | 1:A:81:LYS:HG2 | 16 | 0.59 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 15 | 0.59 |
| (1,331) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:104:ASN:HB3 | 6 | 0.59 |
| (1,235) | 1:A:139:PHE:HZ | 1:A:138:ILE:HG12 | 8 | 0.59 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 16 | 0.59 |
| (1,2113) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:82:VAL:HB | 3 | 0.59 |
| (1,2113) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:82:VAL:HB | 13 | 0.59 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 7 | 0.59 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 14 | 0.59 |
| (1,1815) | 1:A:81:LYS:H | 1:A:81:LYS:HG3 | 12 | 0.59 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 13 | 0.59 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 18 | 0.59 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 14 | 0.59 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 14 | 0.59 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 14 | 0.59 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD12 | 1:A:42:VAL:HA | 19 | 0.59 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD11 | 1:A:42:VAL:HA | 19 | 0.59 |
| (1,1372) | 1:A:21:LEU:HD13 | 1:A:42:VAL:HA | 19 | 0.59 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 11 | 0.59 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 11 | 0.59 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 11 | 0.59 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 12 | 0.59 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 1 | 0.58 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 1 | 0.58 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 1 | 0.58 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 1 | 0.58 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 1 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 1 | 0.58 |
| (2,219) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:16:GLN:HG2 | 6 | 0.58 |
| (2,219) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:16:GLN:HG3 | 6 | 0.58 |
| (1,926) | 1:A:140:GLU:H | 1:A:140:GLU:HB2 | 9 | 0.58 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 2 | 0.58 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 9 | 0.58 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 11 | 0.58 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 13 | 0.58 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 14 | 0.58 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 17 | 0.58 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 18 | 0.58 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 15 | 0.58 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 4 | 0.58 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 15 | 0.58 |
| (1,800) | 1:A:145:GLU:HG3 | 1:A:145:GLU:HB2 | 8 | 0.58 |
| (1,795) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:124:GLU:HG3 | 11 | 0.58 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 14 | 0.58 |
| (1,527) | 1:A:145:GLU:HA | 1:A:146:TRP:HB3 | 15 | 0.58 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 1 | 0.58 |
| (1,2217) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:69:LEU:HB2 | 9 | 0.58 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 7 | 0.58 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 9 | 0.58 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 20 | 0.58 |
| (1,2113) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:82:VAL:HB | 7 | 0.58 |
| (1,2113) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:82:VAL:HB | 8 | 0.58 |
| (1,2113) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:82:VAL:HB | 9 | 0.58 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 3 | 0.58 |
| (1,1730) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:35:GLU:HG3 | 3 | 0.58 |
| (1,1729) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 1 | 0.58 |
| (1,1722) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:49:GLN:HE21 | 19 | 0.58 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 5 | 0.58 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 7 | 0.58 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 3 | 0.58 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 3 | 0.58 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 3 | 0.58 |
| (1,1091) | 1:A:4:LYS:HG3 | 1:A:5:TYR:H | 9 | 0.58 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 20 | 0.57 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 20 | 0.57 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 20 | 0.57 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 20 | 0.57 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 20 | 0.57 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 20 | 0.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,296) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:120:LYS:HG2 | 20 | 0.57 |
| (2,296) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:126:ALA:HB2 | 20 | 0.57 |
| (2,296) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:126:ALA:HB1 | 20 | 0.57 |
| (2,296) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:126:ALA:HB3 | 20 | 0.57 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 11 | 0.57 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 11 | 0.57 |
| (1,926) | 1:A:140:GLU:H | 1:A:140:GLU:HB2 | 11 | 0.57 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 3 | 0.57 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 4 | 0.57 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 12 | 0.57 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 12 | 0.57 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 12 | 0.57 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 15 | 0.57 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 15 | 0.57 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 9 | 0.57 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 20 | 0.57 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 6 | 0.57 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 12 | 0.57 |
| (1,2113) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:82:VAL:HB | 17 | 0.57 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 19 | 0.57 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.57 |
| (1,1729) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 4 | 0.57 |
| (1,1707) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HB3 | 4 | 0.57 |
| (1,1599) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HB3 | 14 | 0.57 |
| (1,1532) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 20 | 0.57 |
| (1,1242) | 1:A:111:ILE:HD12 | 1:A:16:GLN:HG3 | 6 | 0.57 |
| (1,1242) | 1:A:111:ILE:HD11 | 1:A:16:GLN:HG3 | 6 | 0.57 |
| (1,1242) | 1:A:111:ILE:HD13 | 1:A:16:GLN:HG3 | 6 | 0.57 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:82:VAL:HG22 | 1 | 0.57 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:82:VAL:HG21 | 1 | 0.57 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG12 | 1:A:82:VAL:HG23 | 1 | 0.57 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:82:VAL:HG22 | 1 | 0.57 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:82:VAL:HG21 | 1 | 0.57 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG11 | 1:A:82:VAL:HG23 | 1 | 0.57 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:82:VAL:HG22 | 1 | 0.57 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:82:VAL:HG21 | 1 | 0.57 |
| (1,1096) | 1:A:109:VAL:HG13 | 1:A:82:VAL:HG23 | 1 | 0.57 |
| (1,1007) | 1:A:77:ILE:HG13 | 1:A:82:VAL:HA | 19 | 0.57 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 15 | 0.56 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 15 | 0.56 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 15 | 0.56 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 15 | 0.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 15 | 0.56 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 15 | 0.56 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 7 | 0.56 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 7 | 0.56 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 17 | 0.56 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 17 | 0.56 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 10 | 0.56 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 6 | 0.56 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 7 | 0.56 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 9 | 0.56 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 11 | 0.56 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 12 | 0.56 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 17 | 0.56 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 19 | 0.56 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 1 | 0.56 |
| (1,2113) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:82:VAL:HB | 10 | 0.56 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 1 | 0.56 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 9 | 0.56 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 11 | 0.56 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 14 | 0.55 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 14 | 0.55 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 14 | 0.55 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 14 | 0.55 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 14 | 0.55 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 14 | 0.55 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 15 | 0.55 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 15 | 0.55 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 16 | 0.55 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 16 | 0.55 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 19 | 0.55 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 19 | 0.55 |
| (2,219) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:16:GLN:HG2 | 8 | 0.55 |
| (2,219) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:16:GLN:HG3 | 8 | 0.55 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 3 | 0.55 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 11 | 0.55 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 16 | 0.55 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 14 | 0.55 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 5 | 0.55 |
| (1,442) | 1:A:11:SER:HA | 1:A:14:LEU:HB3 | 14 | 0.55 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 7 | 0.55 |
| (1,2113) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:82:VAL:HB | 16 | 0.55 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.55 |
| (1,2109) | 1:A:49:GLN:HE21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.55 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 10 | 0.55 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 16 | 0.55 |
| (1,1904) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HG2 | 1 | 0.55 |
| (1,1904) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HG2 | 7 | 0.55 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 12 | 0.55 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 16 | 0.55 |
| (1,1729) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 20 | 0.55 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 9 | 0.55 |
| (1,1395) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:148:GLU:HB2 | 12 | 0.55 |
| (1,1115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 20 | 0.55 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 3 | 0.55 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 3 | 0.55 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 3 | 0.55 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 9 | 0.54 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 9 | 0.54 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 9 | 0.54 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 9 | 0.54 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 9 | 0.54 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 9 | 0.54 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 11 | 0.54 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 11 | 0.54 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 11 | 0.54 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 11 | 0.54 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 11 | 0.54 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 11 | 0.54 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 4 | 0.54 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 6 | 0.54 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 10 | 0.54 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 13 | 0.54 |
| (1,795) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:124:GLU:HG3 | 10 | 0.54 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 3 | 0.54 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 5 | 0.54 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 20 | 0.54 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 3 | 0.54 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 13 | 0.54 |
| (1,276) | 1:A:100:THR:HB | 1:A:101:ILE:HG12 | 17 | 0.54 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 12 | 0.54 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 3 | 0.54 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 8 | 0.54 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 4 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 18 | 0.54 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 17 | 0.54 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 2 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 2 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 2 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 2 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 2 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 2 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 4 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 4 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 4 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 4 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 4 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 4 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 12 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 12 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 12 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 12 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 12 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 12 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 16 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 16 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 16 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 16 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 16 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 16 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 19 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 19 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 19 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 19 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 19 | 0.53 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 19 | 0.53 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 13 | 0.53 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 13 | 0.53 |
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 2 | 0.53 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 8 | 0.53 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 14 | 0.53 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 16 | 0.53 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 17 | 0.53 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 20 | 0.53 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 13 | 0.53 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 13 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 1 | 0.53 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 2 | 0.53 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 8 | 0.53 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 10 | 0.53 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 12 | 0.53 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 16 | 0.53 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 17 | 0.53 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 18 | 0.53 |
| (1,276) | 1:A:100:THR:HB | 1:A:101:ILE:HG12 | 9 | 0.53 |
| (1,2248) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:94:ASN:HD22 | 4 | 0.53 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 2 | 0.53 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 14 | 0.53 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 5 | 0.53 |
| (1,1853) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:136:ASN:HB2 | 11 | 0.53 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 20 | 0.53 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 2 | 0.52 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 2 | 0.52 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 2 | 0.52 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 5 | 0.52 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 5 | 0.52 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 5 | 0.52 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 5 | 0.52 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 5 | 0.52 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 5 | 0.52 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 6 | 0.52 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 6 | 0.52 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 6 | 0.52 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 6 | 0.52 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 6 | 0.52 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 6 | 0.52 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 18 | 0.52 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 18 | 0.52 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 18 | 0.52 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 18 | 0.52 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 18 | 0.52 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 18 | 0.52 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 1 | 0.52 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 1 | 0.52 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 6 | 0.52 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 6 | 0.52 |
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 13 | 0.52 |
| (1,845) | 1:A:107:GLN:HG2 | 1:A:108:PHE:H | 1 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 5 | 0.52 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 9 | 0.52 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 11 | 0.52 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 12 | 0.52 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 7 | 0.52 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 17 | 0.52 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 18 | 0.52 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 4 | 0.52 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 5 | 0.52 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 6 | 0.52 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 7 | 0.52 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 9 | 0.52 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 14 | 0.52 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 15 | 0.52 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 18 | 0.52 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 19 | 0.52 |
| (1,276) | 1:A:100:THR:HB | 1:A:101:ILE:HG12 | 7 | 0.52 |
| (1,276) | 1:A:100:THR:HB | 1:A:101:ILE:HG12 | 14 | 0.52 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 7 | 0.52 |
| (1,2113) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:82:VAL:HB | 2 | 0.52 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 17 | 0.52 |
| (1,1904) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HG2 | 9 | 0.52 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 1 | 0.52 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 6 | 0.52 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 11 | 0.52 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 14 | 0.52 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 19 | 0.52 |
| (1,1528) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:143:LYS:HB2 | 2 | 0.52 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 1 | 0.52 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 8 | 0.52 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 19 | 0.52 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 13 | 0.51 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 13 | 0.51 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 13 | 0.51 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 10 | 0.51 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 10 | 0.51 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 10 | 0.51 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 10 | 0.51 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 10 | 0.51 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 10 | 0.51 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 5 | 0.51 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 5 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 13 | 0.51 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 13 | 0.51 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 8 | 0.51 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 8 | 0.51 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 8 | 0.51 |
| (1,965) | 1:A:47:LYS:HD2 | 1:A:44:ARG:HA | 18 | 0.51 |
| (1,795) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:124:GLU:HG3 | 6 | 0.51 |
| (1,793) | 1:A:25:GLU:HG2 | 1:A:25:GLU:HA | 19 | 0.51 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 1 | 0.51 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 6 | 0.51 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 9 | 0.51 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 10 | 0.51 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 12 | 0.51 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 16 | 0.51 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 19 | 0.51 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 3 | 0.51 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 11 | 0.51 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 20 | 0.51 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 4 | 0.51 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 9 | 0.51 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 15 | 0.51 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 18 | 0.51 |
| (1,1853) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:136:ASN:HB2 | 1 | 0.51 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 10 | 0.51 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 19 | 0.51 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 4 | 0.51 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 11 | 0.51 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 20 | 0.51 |
| (1,1532) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 2 | 0.51 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 17 | 0.5 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 17 | 0.5 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 17 | 0.5 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 17 | 0.5 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 17 | 0.5 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 17 | 0.5 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 18 | 0.5 |
| (2,373) | 1:A:42:VAL:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 18 | 0.5 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 3 | 0.5 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 3 | 0.5 |
| (2,179) | 1:A:45:LYS:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 17 | 0.5 |
| (2,179) | 1:A:45:LYS:HA | 1:A:45:LYS:HG2 | 17 | 0.5 |
| (1,926) | 1:A:140:GLU:H | 1:A:140:GLU:HB2 | 1 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,882) | 1:A:46:ILE:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 14 | 0.5 |
| (1,793) | 1:A:25:GLU:HG2 | 1:A:25:GLU:HA | 14 | 0.5 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.5 |
| (1,729) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 20 | 0.5 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 16 | 0.5 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 3 | 0.5 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 5 | 0.5 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 6 | 0.5 |
| (1,389) | 1:A:83:VAL:HA | 1:A:83:VAL:HG22 | 9 | 0.5 |
| (1,389) | 1:A:83:VAL:HA | 1:A:83:VAL:HG21 | 9 | 0.5 |
| (1,389) | 1:A:83:VAL:HA | 1:A:83:VAL:HG23 | 9 | 0.5 |
| (1,389) | 1:A:83:VAL:HA | 1:A:83:VAL:HG22 | 12 | 0.5 |
| (1,389) | 1:A:83:VAL:HA | 1:A:83:VAL:HG21 | 12 | 0.5 |
| (1,389) | 1:A:83:VAL:HA | 1:A:83:VAL:HG23 | 12 | 0.5 |
| (1,387) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:65:ASP:HB3 | 20 | 0.5 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 17 | 0.5 |
| (1,2204) | 1:A:61:TYR:H | 1:A:62:PRO:HD2 | 19 | 0.5 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 5 | 0.5 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 6 | 0.5 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 8 | 0.5 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 2 | 0.5 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 12 | 0.5 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 16 | 0.5 |
| (1,1532) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 18 | 0.5 |
| (1,1453) | 1:A:146:TRP:H | 1:A:145:GLU:HB3 | 2 | 0.5 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 9 | 0.5 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 1 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 1 | 0.49 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 1 | 0.49 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 18 | 0.49 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 18 | 0.49 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 13 | 0.49 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 13 | 0.49 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 13 | 0.49 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 13 | 0.49 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 13 | 0.49 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 13 | 0.49 |
| (2,204) | 1:A:142:GLN:HA | 1:A:142:GLN:HG2 | 12 | 0.49 |
| (2,204) | 1:A:142:GLN:HA | 1:A:142:GLN:HG3 | 12 | 0.49 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 20 | 0.49 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 20 | 0.49 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 20 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 7 | 0.49 |
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 18 | 0.49 |
| (1,795) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:124:GLU:HG3 | 12 | 0.49 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 4 | 0.49 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 11 | 0.49 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 8 | 0.49 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 10 | 0.49 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 11 | 0.49 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 11 | 0.49 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 12 | 0.49 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 14 | 0.49 |
| (1,1951) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:104:ASN:HB3 | 1 | 0.49 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 20 | 0.49 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 7 | 0.49 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 10 | 0.49 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 1 | 0.49 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 5 | 0.49 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 18 | 0.49 |
| (1,1528) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:143:LYS:HB2 | 5 | 0.49 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 7 | 0.48 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 7 | 0.48 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 7 | 0.48 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 7 | 0.48 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 7 | 0.48 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 7 | 0.48 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 8 | 0.48 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 8 | 0.48 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 8 | 0.48 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 8 | 0.48 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 8 | 0.48 |
| (2,532) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 8 | 0.48 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 17 | 0.48 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 17 | 0.48 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 17 | 0.48 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 16 | 0.48 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 16 | 0.48 |
| (1,882) | 1:A:46:ILE:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 7 | 0.48 |
| (1,882) | 1:A:46:ILE:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 17 | 0.48 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 2 | 0.48 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 9 | 0.48 |
| (1,520) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HG2 | 12 | 0.48 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 2 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 3 | 0.48 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 4 | 0.48 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 6 | 0.48 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 9 | 0.48 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 11 | 0.48 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 13 | 0.48 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 15 | 0.48 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 17 | 0.48 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 18 | 0.48 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 19 | 0.48 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 20 | 0.48 |
| (1,387) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:65:ASP:HB3 | 14 | 0.48 |
| (1,276) | 1:A:100:THR:HB | 1:A:101:ILE:HG12 | 4 | 0.48 |
| (1,1951) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:104:ASN:HB3 | 4 | 0.48 |
| (1,1951) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:104:ASN:HB3 | 5 | 0.48 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 13 | 0.48 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 16 | 0.48 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 15 | 0.48 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 17 | 0.48 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 12 | 0.48 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 17 | 0.48 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 19 | 0.48 |
| (1,1722) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:49:GLN:HE21 | 1 | 0.48 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 3 | 0.48 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 6 | 0.48 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 7 | 0.48 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 10 | 0.48 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 19 | 0.48 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD11 | 19 | 0.48 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD13 | 19 | 0.48 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD12 | 19 | 0.48 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 19 | 0.48 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD13 | 19 | 0.48 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD12 | 19 | 0.48 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD11 | 19 | 0.48 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD13 | 19 | 0.48 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 6 | 0.48 |
| (2,86) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG22 | 9 | 0.47 |
| (2,86) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG21 | 9 | 0.47 |
| (2,86) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG23 | 9 | 0.47 |
| (2,86) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:59:LEU:HD22 | 9 | 0.47 |
| (2,86) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:59:LEU:HD21 | 9 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,86) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:59:LEU:HD23 | 9 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 16 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 16 | 0.47 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 16 | 0.47 |
| (2,459) | 1:A:142:GLN:H | 1:A:142:GLN:HG2 | 5 | 0.47 |
| (2,459) | 1:A:142:GLN:H | 1:A:142:GLN:HG3 | 5 | 0.47 |
| (2,459) | 1:A:142:GLN:H | 1:A:142:GLN:HG2 | 17 | 0.47 |
| (2,459) | 1:A:142:GLN:H | 1:A:142:GLN:HG3 | 17 | 0.47 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 5 | 0.47 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 5 | 0.47 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 11 | 0.47 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 11 | 0.47 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 1 | 0.47 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 1 | 0.47 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 2 | 0.47 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 2 | 0.47 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 12 | 0.47 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 12 | 0.47 |
| (1,946) | 1:A:142:GLN:H | 1:A:142:GLN:HB2 | 12 | 0.47 |
| (1,793) | 1:A:25:GLU:HG2 | 1:A:25:GLU:HA | 11 | 0.47 |
| (1,629) | 1:A:135:LEU:HB2 | 1:A:135:LEU:HD12 | 14 | 0.47 |
| (1,629) | 1:A:135:LEU:HB2 | 1:A:135:LEU:HD11 | 14 | 0.47 |
| (1,629) | 1:A:135:LEU:HB2 | 1:A:135:LEU:HD13 | 14 | 0.47 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 1 | 0.47 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 5 | 0.47 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 7 | 0.47 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 8 | 0.47 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 10 | 0.47 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 12 | 0.47 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 14 | 0.47 |
| (1,445) | 1:A:92:CYS:HA | 1:A:92:CYS:HB2 | 16 | 0.47 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 6 | 0.47 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 16 | 0.47 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 20 | 0.47 |
| (1,2012) | 1:A:24:ASN:HD22 | 1:A:24:ASN:HB3 | 20 | 0.47 |
| (1,2006) | 1:A:127:SER:H | 1:A:127:SER:HB3 | 6 | 0.47 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 2 | 0.47 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 9 | 0.47 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 20 | 0.47 |
| (1,1951) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:104:ASN:HB3 | 11 | 0.47 |
| (1,1951) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:104:ASN:HB3 | 17 | 0.47 |
| (1,1939) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HG12 | 9 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1939) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HG11 | 9 | 0.47 |
| (1,1939) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HG13 | 9 | 0.47 |
| (1,1907) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HB2 | 2 | 0.47 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 14 | 0.47 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 7 | 0.47 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 15 | 0.47 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 4 | 0.47 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 9 | 0.47 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 15 | 0.47 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 18 | 0.47 |
| (1,1722) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:49:GLN:HE21 | 5 | 0.47 |
| (1,1606) | 1:A:49:GLN:H | 1:A:48:ASN:HB3 | 15 | 0.47 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 8 | 0.47 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 15 | 0.47 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 17 | 0.47 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 17 | 0.47 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 17 | 0.47 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 16 | 0.46 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 16 | 0.46 |
| (2,459) | 1:A:142:GLN:H | 1:A:142:GLN:HG2 | 1 | 0.46 |
| (2,459) | 1:A:142:GLN:H | 1:A:142:GLN:HG3 | 1 | 0.46 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 20 | 0.46 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 20 | 0.46 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 20 | 0.46 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 8 | 0.46 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 8 | 0.46 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 8 | 0.46 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.46 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.46 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.46 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 12 | 0.46 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 12 | 0.46 |
| (1,79) | 1:A:5:TYR:HB2 | 1:A:5:TYR:HD2 | 20 | 0.46 |
| (1,777) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.46 |
| (1,730) | 1:A:136:ASN:HD22 | 1:A:136:ASN:HB2 | 6 | 0.46 |
| (1,730) | 1:A:136:ASN:HD22 | 1:A:136:ASN:HB2 | 11 | 0.46 |
| (1,629) | 1:A:135:LEU:HB2 | 1:A:135:LEU:HD12 | 7 | 0.46 |
| (1,629) | 1:A:135:LEU:HB2 | 1:A:135:LEU:HD11 | 7 | 0.46 |
| (1,629) | 1:A:135:LEU:HB2 | 1:A:135:LEU:HD13 | 7 | 0.46 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 11 | 0.46 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 12 | 0.46 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 13 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2248) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:94:ASN:HD22 | 5 | 0.46 |
| (1,2248) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:94:ASN:HD22 | 7 | 0.46 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 13 | 0.46 |
| (1,2062) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:48:ASN:HB3 | 15 | 0.46 |
| (1,2012) | 1:A:24:ASN:HD22 | 1:A:24:ASN:HB3 | 1 | 0.46 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 3 | 0.46 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 7 | 0.46 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 13 | 0.46 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 17 | 0.46 |
| (1,1955) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:72:ASN:HB3 | 19 | 0.46 |
| (1,1951) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:104:ASN:HB3 | 2 | 0.46 |
| (1,1951) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:104:ASN:HB3 | 8 | 0.46 |
| (1,1951) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:104:ASN:HB3 | 14 | 0.46 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 3 | 0.46 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 1 | 0.46 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 20 | 0.46 |
| (1,1606) | 1:A:49:GLN:H | 1:A:48:ASN:HB3 | 16 | 0.46 |
| (1,1574) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HG3 | 13 | 0.46 |
| (1,1532) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 16 | 0.46 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 11 | 0.46 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 16 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 5 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 5 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 5 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 8 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 8 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 8 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 10 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 10 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 10 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 12 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 12 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 12 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 13 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 13 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 13 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 15 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 15 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 15 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 17 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 17 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 17 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 18 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 18 | 0.46 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 18 | 0.46 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 11 | 0.45 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 11 | 0.45 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 11 | 0.45 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 2 | 0.45 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 2 | 0.45 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 10 | 0.45 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 10 | 0.45 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 15 | 0.45 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 15 | 0.45 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 15 | 0.45 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 10 | 0.45 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 10 | 0.45 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 10 | 0.45 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.45 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.45 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.45 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 3 | 0.45 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 3 | 0.45 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 17 | 0.45 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 17 | 0.45 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 13 | 0.45 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 13 | 0.45 |
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 4 | 0.45 |
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 6 | 0.45 |
| (1,730) | 1:A:136:ASN:HD22 | 1:A:136:ASN:HB2 | 8 | 0.45 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.45 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.45 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.45 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.45 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.45 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.45 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 18 | 0.45 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 18 | 0.45 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 18 | 0.45 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 2 | 0.45 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 2 | 0.45 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 2 | 0.45 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 4 | 0.45 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 3 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 14 | 0.45 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 19 | 0.45 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 9 | 0.45 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 11 | 0.45 |
| (1,2012) | 1:A:24:ASN:HD22 | 1:A:24:ASN:HB3 | 4 | 0.45 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 4 | 0.45 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 6 | 0.45 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 15 | 0.45 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 18 | 0.45 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 9 | 0.45 |
| (1,1532) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 15 | 0.45 |
| (1,115) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HB3 | 14 | 0.45 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 6 | 0.44 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 6 | 0.44 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 6 | 0.44 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 3 | 0.44 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 3 | 0.44 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 11 | 0.44 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 11 | 0.44 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 13 | 0.44 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 13 | 0.44 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 15 | 0.44 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 15 | 0.44 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 1 | 0.44 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 1 | 0.44 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 7 | 0.44 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 7 | 0.44 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 18 | 0.44 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 18 | 0.44 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 18 | 0.44 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 18 | 0.44 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 18 | 0.44 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 18 | 0.44 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 7 | 0.44 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 7 | 0.44 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 7 | 0.44 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 0.44 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 0.44 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 0.44 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 7 | 0.44 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 7 | 0.44 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 16 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 16 | 0.44 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 1 | 0.44 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 1 | 0.44 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 9 | 0.44 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 9 | 0.44 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 9 | 0.44 |
| (1,730) | 1:A:136:ASN:HD22 | 1:A:136:ASN:HB2 | 1 | 0.44 |
| (1,730) | 1:A:136:ASN:HD22 | 1:A:136:ASN:HB2 | 20 | 0.44 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.44 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.44 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.44 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 0.44 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 0.44 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 0.44 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.44 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.44 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.44 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.44 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.44 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.44 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.44 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.44 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.44 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 10 | 0.44 |
| (1,520) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HG2 | 8 | 0.44 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 5 | 0.44 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 4 | 0.44 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 5 | 0.44 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 8 | 0.44 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 19 | 0.44 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 18 | 0.44 |
| (1,1951) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:104:ASN:HB3 | 9 | 0.44 |
| (1,1951) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:104:ASN:HB3 | 20 | 0.44 |
| (1,1939) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HG12 | 12 | 0.44 |
| (1,1939) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HG11 | 12 | 0.44 |
| (1,1939) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HG13 | 12 | 0.44 |
| (1,1778) | 1:A:126:ALA:H | 1:A:125:ASN:H | 15 | 0.44 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 2 | 0.44 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 16 | 0.44 |
| (1,1532) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 19 | 0.44 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 1 | 0.44 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 1 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 1 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 1 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 1 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 1 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 2 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 2 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 2 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 3 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 3 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 3 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 6 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 6 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 6 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 7 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 7 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 7 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 9 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 9 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 9 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 11 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 11 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 11 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 14 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 14 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 14 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 16 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 16 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 16 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 19 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 19 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 19 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 20 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 20 | 0.44 |
| (1,1058) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 20 | 0.44 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 4 | 0.43 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 4 | 0.43 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 4 | 0.43 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 1 | 0.43 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 1 | 0.43 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 4 | 0.43 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 4 | 0.43 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 17 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 17 | 0.43 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 20 | 0.43 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 20 | 0.43 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 4 | 0.43 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 4 | 0.43 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 13 | 0.43 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 13 | 0.43 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 8 | 0.43 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 8 | 0.43 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 8 | 0.43 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 20 | 0.43 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 20 | 0.43 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 3 | 0.43 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 3 | 0.43 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 3 | 0.43 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 3 | 0.43 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 3 | 0.43 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 3 | 0.43 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 3 | 0.43 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 3 | 0.43 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 3 | 0.43 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 7 | 0.43 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 7 | 0.43 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 7 | 0.43 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 7 | 0.43 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 7 | 0.43 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 7 | 0.43 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 10 | 0.43 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 10 | 0.43 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 10 | 0.43 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 10 | 0.43 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 10 | 0.43 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 10 | 0.43 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 12 | 0.43 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 12 | 0.43 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 12 | 0.43 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 12 | 0.43 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 12 | 0.43 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 12 | 0.43 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 11 | 0.43 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 11 | 0.43 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 11 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 0.43 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 0.43 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 0.43 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 9 | 0.43 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 9 | 0.43 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 18 | 0.43 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 18 | 0.43 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 19 | 0.43 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 19 | 0.43 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 2 | 0.43 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 10 | 0.43 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 13 | 0.43 |
| (1,730) | 1:A:136:ASN:HD22 | 1:A:136:ASN:HB2 | 4 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 17 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 17 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 17 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 19 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 19 | 0.43 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 19 | 0.43 |
| (1,319) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HB2 | 17 | 0.43 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 19 | 0.43 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 16 | 0.43 |
| (1,1951) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:104:ASN:HB3 | 7 | 0.43 |
| (1,1951) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:104:ASN:HB3 | 12 | 0.43 |
| (1,1951) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:104:ASN:HB3 | 13 | 0.43 |
| (1,1951) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:104:ASN:HB3 | 16 | 0.43 |
| (1,1951) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:104:ASN:HB3 | 19 | 0.43 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 17 | 0.43 |
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 3 | 0.43 |
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 11 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 20 | 0.43 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 4 | 0.43 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 17 | 0.43 |
| (1,1532) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 6 | 0.43 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 13 | 0.43 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 13 | 0.43 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 13 | 0.43 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 14 | 0.42 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 14 | 0.42 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 14 | 0.42 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 8 | 0.42 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 8 | 0.42 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 15 | 0.42 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 15 | 0.42 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 4 | 0.42 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 4 | 0.42 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 4 | 0.42 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB2 | 4 | 0.42 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB1 | 4 | 0.42 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB3 | 4 | 0.42 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 13 | 0.42 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 13 | 0.42 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 14 | 0.42 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 14 | 0.42 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 20 | 0.42 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 20 | 0.42 |
| (2,219) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:16:GLN:HG2 | 4 | 0.42 |
| (2,219) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:16:GLN:HG3 | 4 | 0.42 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 5 | 0.42 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 5 | 0.42 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 7 | 0.42 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 7 | 0.42 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 9 | 0.42 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 9 | 0.42 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 16 | 0.42 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 2 | 0.42 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.42 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.42 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.42 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.42 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.42 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.42 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.42 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.42 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.42 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.42 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.42 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 20 | 0.42 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 20 | 0.42 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 20 | 0.42 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 12 | 0.42 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 18 | 0.42 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 8 | 0.42 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 13 | 0.42 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 19 | 0.42 |
| (1,336) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:50:SER:HB3 | 19 | 0.42 |
| (1,276) | 1:A:100:THR:HB | 1:A:101:ILE:HG12 | 15 | 0.42 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 5 | 0.42 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 18 | 0.42 |
| (1,2248) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:94:ASN:HD22 | 12 | 0.42 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 3 | 0.42 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 7 | 0.42 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 8 | 0.42 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 12 | 0.42 |
| (1,2062) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:48:ASN:HB3 | 16 | 0.42 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 2 | 0.42 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 7 | 0.42 |
| (1,1951) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:104:ASN:HB3 | 3 | 0.42 |
| (1,1951) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:104:ASN:HB3 | 6 | 0.42 |
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 6 | 0.42 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 5 | 0.42 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 3 | 0.42 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 11 | 0.42 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 12 | 0.42 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 16 | 0.42 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 16 | 0.42 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 16 | 0.42 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 17 | 0.42 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 17 | 0.42 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 17 | 0.42 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 7 | 0.41 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 7 | 0.41 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 7 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,459) | 1:A:142:GLN:H | 1:A:142:GLN:HG2 | 14 | 0.41 |
| (2,459) | 1:A:142:GLN:H | 1:A:142:GLN:HG3 | 14 | 0.41 |
| (2,459) | 1:A:142:GLN:H | 1:A:142:GLN:HG2 | 20 | 0.41 |
| (2,459) | 1:A:142:GLN:H | 1:A:142:GLN:HG3 | 20 | 0.41 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 16 | 0.41 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 16 | 0.41 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 17 | 0.41 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 17 | 0.41 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 19 | 0.41 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 19 | 0.41 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 9 | 0.41 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 9 | 0.41 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 9 | 0.41 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 8 | 0.41 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 8 | 0.41 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 4 | 0.41 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 4 | 0.41 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 4 | 0.41 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 4 | 0.41 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 4 | 0.41 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 4 | 0.41 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 4 | 0.41 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 4 | 0.41 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 4 | 0.41 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 5 | 0.41 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 5 | 0.41 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 5 | 0.41 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 5 | 0.41 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 5 | 0.41 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 5 | 0.41 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 20 | 0.41 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 20 | 0.41 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 20 | 0.41 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 20 | 0.41 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 20 | 0.41 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 20 | 0.41 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 3 | 0.41 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 3 | 0.41 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 3 | 0.41 |
| (2,118) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:135:LEU:HD12 | 20 | 0.41 |
| (2,118) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:135:LEU:HD11 | 20 | 0.41 |
| (2,118) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:135:LEU:HD13 | 20 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,118) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:135:LEU:HD12 | 20 | 0.41 |
| (2,118) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:135:LEU:HD11 | 20 | 0.41 |
| (2,118) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:135:LEU:HD13 | 20 | 0.41 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 4 | 0.41 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 5 | 0.41 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 6 | 0.41 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 12 | 0.41 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 18 | 0.41 |
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 9 | 0.41 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 9 | 0.41 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 9 | 0.41 |
| (1,649) | 1:A:54:LEU:HB2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 9 | 0.41 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 5 | 0.41 |
| (1,436) | 1:A:45:LYS:HA | 1:A:45:LYS:HG3 | 13 | 0.41 |
| (1,436) | 1:A:45:LYS:HA | 1:A:45:LYS:HG3 | 16 | 0.41 |
| (1,356) | 1:A:110:SER:H | 1:A:110:SER:HB3 | 6 | 0.41 |
| (1,356) | 1:A:110:SER:H | 1:A:110:SER:HB3 | 8 | 0.41 |
| (1,356) | 1:A:110:SER:H | 1:A:110:SER:HB3 | 10 | 0.41 |
| (1,356) | 1:A:110:SER:H | 1:A:110:SER:HB3 | 11 | 0.41 |
| (1,356) | 1:A:110:SER:H | 1:A:110:SER:HB3 | 14 | 0.41 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 2 | 0.41 |
| (1,233) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:47:LYS:HG2 | 15 | 0.41 |
| (1,214) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HB3 | 8 | 0.41 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 7 | 0.41 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 2 | 0.41 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 6 | 0.41 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 10 | 0.41 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 20 | 0.41 |
| (1,2012) | 1:A:24:ASN:HD22 | 1:A:24:ASN:HB3 | 10 | 0.41 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 1 | 0.41 |
| (1,1994) | 1:A:92:CYS:H | 1:A:92:CYS:HB3 | 10 | 0.41 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 1 | 0.41 |
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 1 | 0.41 |
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 4 | 0.41 |
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 12 | 0.41 |
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 15 | 0.41 |
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 16 | 0.41 |
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 18 | 0.41 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 13 | 0.41 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 13 | 0.41 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 14 | 0.41 |
| (1,1709) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 4 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1709) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 4 | 0.41 |
| (1,1709) | 1:A:17:LEU:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 4 | 0.41 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 6 | 0.41 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 9 | 0.41 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 15 | 0.41 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 3 | 0.41 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 3 | 0.41 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 3 | 0.41 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 4 | 0.41 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 4 | 0.41 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 4 | 0.41 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 6 | 0.41 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 6 | 0.41 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 6 | 0.41 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 8 | 0.41 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 8 | 0.41 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 8 | 0.41 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 19 | 0.41 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 19 | 0.41 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 19 | 0.41 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 6 | 0.4 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 6 | 0.4 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 10 | 0.4 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 10 | 0.4 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 2 | 0.4 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 2 | 0.4 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 20 | 0.4 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 20 | 0.4 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 4 | 0.4 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 4 | 0.4 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 4 | 0.4 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 4 | 0.4 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 4 | 0.4 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 4 | 0.4 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 11 | 0.4 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 11 | 0.4 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 10 | 0.4 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 10 | 0.4 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 19 | 0.4 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 19 | 0.4 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 3 | 0.4 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 7 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 15 | 0.4 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 17 | 0.4 |
| (1,933) | 1:A:121:ARG:HB2 | 1:A:121:ARG:HD2 | 6 | 0.4 |
| (1,882) | 1:A:46:ILE:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 11 | 0.4 |
| (1,795) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:124:GLU:HG3 | 13 | 0.4 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 17 | 0.4 |
| (1,49) | 1:A:146:TRP:HD1 | 1:A:146:TRP:HA | 3 | 0.4 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 9 | 0.4 |
| (1,2248) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:94:ASN:HD22 | 16 | 0.4 |
| (1,216) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HG2 | 18 | 0.4 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 15 | 0.4 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 18 | 0.4 |
| (1,2050) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 10 | 0.4 |
| (1,2012) | 1:A:24:ASN:HD22 | 1:A:24:ASN:HB3 | 17 | 0.4 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 4 | 0.4 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 10 | 0.4 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 13 | 0.4 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 15 | 0.4 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 17 | 0.4 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 19 | 0.4 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 8 | 0.4 |
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 5 | 0.4 |
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 7 | 0.4 |
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 10 | 0.4 |
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 13 | 0.4 |
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 19 | 0.4 |
| (1,1761) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:30:ASP:HB2 | 5 | 0.4 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 16 | 0.4 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 1 | 0.4 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 3 | 0.4 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 1 | 0.4 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 7 | 0.4 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 8 | 0.4 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 9 | 0.4 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 12 | 0.4 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 16 | 0.4 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 19 | 0.4 |
| (1,1453) | 1:A:146:TRP:H | 1:A:145:GLU:HB3 | 1 | 0.4 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 16 | 0.4 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 16 | 0.4 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 16 | 0.4 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 6 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 6 | 0.4 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 6 | 0.4 |
| (1,1000) | 1:A:44:ARG:HG3 | 1:A:44:ARG:HA | 3 | 0.4 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 3 | 0.39 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 3 | 0.39 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 3 | 0.39 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 10 | 0.39 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 10 | 0.39 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 10 | 0.39 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 17 | 0.39 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 17 | 0.39 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 17 | 0.39 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 18 | 0.39 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 18 | 0.39 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 18 | 0.39 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 20 | 0.39 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 20 | 0.39 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 20 | 0.39 |
| (2,550) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 5 | 0.39 |
| (2,550) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:59:LEU:HG | 5 | 0.39 |
| (2,525) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:59:LEU:HD12 | 9 | 0.39 |
| (2,525) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:59:LEU:HD11 | 9 | 0.39 |
| (2,525) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:59:LEU:HD13 | 9 | 0.39 |
| (2,525) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:111:ILE:HD12 | 9 | 0.39 |
| (2,525) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:111:ILE:HD11 | 9 | 0.39 |
| (2,525) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:111:ILE:HD13 | 9 | 0.39 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 6 | 0.39 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 6 | 0.39 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 9 | 0.39 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 9 | 0.39 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 7 | 0.39 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 7 | 0.39 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 7 | 0.39 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 11 | 0.39 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 11 | 0.39 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 11 | 0.39 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 14 | 0.39 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 14 | 0.39 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 14 | 0.39 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 6 | 0.39 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 6 | 0.39 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 6 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.39 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.39 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.39 |
| (2,244) | 1:A:95:ASN:HB3 | 1:A:93:LEU:HA | 6 | 0.39 |
| (2,244) | 1:A:95:ASN:HB3 | 1:A:97:SER:HB3 | 6 | 0.39 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 11 | 0.39 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 11 | 0.39 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 11 | 0.39 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 11 | 0.39 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 3 | 0.39 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 3 | 0.39 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 15 | 0.39 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 15 | 0.39 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 10 | 0.39 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 10 | 0.39 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 9 | 0.39 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 11 | 0.39 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 14 | 0.39 |
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 14 | 0.39 |
| (1,808) | 1:A:145:GLU:HG3 | 1:A:145:GLU:HA | 16 | 0.39 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 15 | 0.39 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 1 | 0.39 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 1 | 0.39 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 1 | 0.39 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 8 | 0.39 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 8 | 0.39 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 8 | 0.39 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 11 | 0.39 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 11 | 0.39 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 11 | 0.39 |
| (1,436) | 1:A:45:LYS:HA | 1:A:45:LYS:HG3 | 5 | 0.39 |
| (1,436) | 1:A:45:LYS:HA | 1:A:45:LYS:HG3 | 19 | 0.39 |
| (1,242) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG2 | 19 | 0.39 |
| (1,2220) | 1:A:76:LYS:H | 1:A:82:VAL:HG22 | 1 | 0.39 |
| (1,2220) | 1:A:76:LYS:H | 1:A:82:VAL:HG21 | 1 | 0.39 |
| (1,2220) | 1:A:76:LYS:H | 1:A:82:VAL:HG23 | 1 | 0.39 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 13 | 0.39 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 14 | 0.39 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 13 | 0.39 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 14 | 0.39 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 16 | 0.39 |
| (1,2050) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 1 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1951) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:104:ASN:HB3 | 10 | 0.39 |
| (1,1797) | 1:A:81:LYS:H | 1:A:79:ASN:HB3 | 9 | 0.39 |
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 2 | 0.39 |
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 9 | 0.39 |
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 14 | 0.39 |
| (1,1763) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HB3 | 17 | 0.39 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 10 | 0.39 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 2 | 0.39 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 7 | 0.39 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 14 | 0.39 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 2 | 0.39 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 3 | 0.39 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 6 | 0.39 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 10 | 0.39 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 13 | 0.39 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 15 | 0.39 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 17 | 0.39 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 18 | 0.39 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 20 | 0.39 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 1 | 0.39 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 1 | 0.39 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 1 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 2 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 2 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 2 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 5 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 5 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 5 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 7 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 7 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 7 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 10 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 10 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 10 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 13 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 13 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 13 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 20 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 20 | 0.39 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 20 | 0.39 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 5 | 0.39 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 5 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 5 | 0.39 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 9 | 0.38 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 9 | 0.38 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 9 | 0.38 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 9 | 0.38 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 9 | 0.38 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 9 | 0.38 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 15 | 0.38 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 15 | 0.38 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 15 | 0.38 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 8 | 0.38 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 8 | 0.38 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 8 | 0.38 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 12 | 0.38 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 12 | 0.38 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 12 | 0.38 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 18 | 0.38 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 18 | 0.38 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 5 | 0.38 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 5 | 0.38 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 6 | 0.38 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 6 | 0.38 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 10 | 0.38 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 10 | 0.38 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 19 | 0.38 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 19 | 0.38 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 19 | 0.38 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 19 | 0.38 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 19 | 0.38 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 19 | 0.38 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 14 | 0.38 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 14 | 0.38 |
| (2,164) | 1:A:131:SER:HB3 | 1:A:131:SER:H | 4 | 0.38 |
| (2,164) | 1:A:127:SER:H | 1:A:127:SER:HB3 | 4 | 0.38 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 15 | 0.38 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 15 | 0.38 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 15 | 0.38 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 2 | 0.38 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 2 | 0.38 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 17 | 0.38 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 17 | 0.38 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 20 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 20 | 0.38 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 8 | 0.38 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 20 | 0.38 |
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 11 | 0.38 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 5 | 0.38 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 5 | 0.38 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 5 | 0.38 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 12 | 0.38 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 12 | 0.38 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 12 | 0.38 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 16 | 0.38 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 16 | 0.38 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 16 | 0.38 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 20 | 0.38 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 20 | 0.38 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 20 | 0.38 |
| (1,520) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HG2 | 18 | 0.38 |
| (1,436) | 1:A:45:LYS:HA | 1:A:45:LYS:HG3 | 6 | 0.38 |
| (1,436) | 1:A:45:LYS:HA | 1:A:45:LYS:HG3 | 18 | 0.38 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 16 | 0.38 |
| (1,387) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:65:ASP:HB3 | 13 | 0.38 |
| (1,336) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:50:SER:HB3 | 17 | 0.38 |
| (1,2327) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD12 | 4 | 0.38 |
| (1,2327) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD11 | 4 | 0.38 |
| (1,2327) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD13 | 4 | 0.38 |
| (1,2327) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD12 | 4 | 0.38 |
| (1,2327) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD11 | 4 | 0.38 |
| (1,2327) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD13 | 4 | 0.38 |
| (1,2327) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD12 | 4 | 0.38 |
| (1,2327) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD11 | 4 | 0.38 |
| (1,2327) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD13 | 4 | 0.38 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 1 | 0.38 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 5 | 0.38 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 6 | 0.38 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 8 | 0.38 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 9 | 0.38 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 16 | 0.38 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 10 | 0.38 |
| (1,1864) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HG2 | 3 | 0.38 |
| (1,1797) | 1:A:81:LYS:H | 1:A:79:ASN:HB3 | 15 | 0.38 |
| (1,1762) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 14 | 0.38 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 8 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 5 | 0.38 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 8 | 0.38 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 8 | 0.38 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 8 | 0.38 |
| (1,1276) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:72:ASN:HB3 | 5 | 0.38 |
| (1,1276) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:72:ASN:HB3 | 5 | 0.38 |
| (1,1276) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:72:ASN:HB3 | 5 | 0.38 |
| (1,1276) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:72:ASN:HB3 | 9 | 0.38 |
| (1,1276) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:72:ASN:HB3 | 9 | 0.38 |
| (1,1276) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:72:ASN:HB3 | 9 | 0.38 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 11 | 0.38 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 11 | 0.38 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 11 | 0.38 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 18 | 0.38 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 18 | 0.38 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 18 | 0.38 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 4 | 0.37 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 4 | 0.37 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 4 | 0.37 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 4 | 0.37 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 4 | 0.37 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 4 | 0.37 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 7 | 0.37 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 7 | 0.37 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 7 | 0.37 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 7 | 0.37 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 7 | 0.37 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 7 | 0.37 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 12 | 0.37 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 12 | 0.37 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 12 | 0.37 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 5 | 0.37 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 5 | 0.37 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 5 | 0.37 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 15 | 0.37 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 15 | 0.37 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 15 | 0.37 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 12 | 0.37 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 12 | 0.37 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 15 | 0.37 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 15 | 0.37 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 5 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 5 | 0.37 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 5 | 0.37 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 5 | 0.37 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 5 | 0.37 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 5 | 0.37 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 5 | 0.37 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 5 | 0.37 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 5 | 0.37 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:92:CYS:HB3 | 9 | 0.37 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:92:CYS:HB3 | 9 | 0.37 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:92:CYS:HB3 | 9 | 0.37 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HB2 | 9 | 0.37 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HB2 | 9 | 0.37 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HB2 | 9 | 0.37 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 20 | 0.37 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 20 | 0.37 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 20 | 0.37 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 20 | 0.37 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 20 | 0.37 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 20 | 0.37 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 10 | 0.37 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 10 | 0.37 |
| (2,209) | 1:A:79:ASN:HA | 1:A:79:ASN:HB2 | 3 | 0.37 |
| (2,209) | 1:A:147:HIS:HA | 1:A:147:HIS:HB2 | 3 | 0.37 |
| (2,209) | 1:A:79:ASN:HA | 1:A:79:ASN:HB2 | 7 | 0.37 |
| (2,209) | 1:A:147:HIS:HA | 1:A:147:HIS:HB2 | 7 | 0.37 |
| (2,209) | 1:A:79:ASN:HA | 1:A:79:ASN:HB2 | 14 | 0.37 |
| (2,209) | 1:A:147:HIS:HA | 1:A:147:HIS:HB2 | 14 | 0.37 |
| (2,209) | 1:A:79:ASN:HA | 1:A:79:ASN:HB2 | 15 | 0.37 |
| (2,209) | 1:A:147:HIS:HA | 1:A:147:HIS:HB2 | 15 | 0.37 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 5 | 0.37 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 5 | 0.37 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 2 | 0.37 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 2 | 0.37 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 2 | 0.37 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 1 | 0.37 |
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 8 | 0.37 |
| (1,802) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:57:GLU:HA | 12 | 0.37 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 20 | 0.37 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 3 | 0.37 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 3 | 0.37 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 3 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 6 | 0.37 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 6 | 0.37 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 6 | 0.37 |
| (1,436) | 1:A:45:LYS:HA | 1:A:45:LYS:HG3 | 12 | 0.37 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 4 | 0.37 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 17 | 0.37 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 9 | 0.37 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 6 | 0.37 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 16 | 0.37 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 2 | 0.37 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 12 | 0.37 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 12 | 0.37 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 12 | 0.37 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 12 | 0.37 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 15 | 0.37 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 15 | 0.37 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 15 | 0.37 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 4 | 0.36 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 4 | 0.36 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 4 | 0.36 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 6 | 0.36 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 6 | 0.36 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 6 | 0.36 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 10 | 0.36 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 10 | 0.36 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 10 | 0.36 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 16 | 0.36 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 16 | 0.36 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 16 | 0.36 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:62:PRO:HG2 | 19 | 0.36 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:107:GLN:HB3 | 19 | 0.36 |
| (2,62) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:107:GLN:HB3 | 19 | 0.36 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 8 | 0.36 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 8 | 0.36 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 3 | 0.36 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 3 | 0.36 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 12 | 0.36 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 12 | 0.36 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 11 | 0.36 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 11 | 0.36 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 12 | 0.36 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 12 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 14 | 0.36 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 14 | 0.36 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 15 | 0.36 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 15 | 0.36 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 15 | 0.36 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 15 | 0.36 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 15 | 0.36 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 15 | 0.36 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 15 | 0.36 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 15 | 0.36 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 15 | 0.36 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 9 | 0.36 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 9 | 0.36 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 9 | 0.36 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 9 | 0.36 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 9 | 0.36 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 9 | 0.36 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 1 | 0.36 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 1 | 0.36 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 1 | 0.36 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 1 | 0.36 |
| (2,209) | 1:A:79:ASN:HA | 1:A:79:ASN:HB2 | 12 | 0.36 |
| (2,209) | 1:A:147:HIS:HA | 1:A:147:HIS:HB2 | 12 | 0.36 |
| (2,209) | 1:A:79:ASN:HA | 1:A:79:ASN:HB2 | 17 | 0.36 |
| (2,209) | 1:A:147:HIS:HA | 1:A:147:HIS:HB2 | 17 | 0.36 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD22 | 9 | 0.36 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD21 | 9 | 0.36 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD23 | 9 | 0.36 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 9 | 0.36 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 9 | 0.36 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 9 | 0.36 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 9 | 0.36 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 9 | 0.36 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 9 | 0.36 |
| (2,179) | 1:A:45:LYS:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 7 | 0.36 |
| (2,179) | 1:A:45:LYS:HA | 1:A:45:LYS:HG2 | 7 | 0.36 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 1 | 0.36 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 1 | 0.36 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 10 | 0.36 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 10 | 0.36 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 14 | 0.36 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 14 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 19 | 0.36 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 19 | 0.36 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:5:TYR:HB3 | 3 | 0.36 |
| (2,12) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:5:TYR:HB3 | 3 | 0.36 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 10 | 0.36 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 10 | 0.36 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 10 | 0.36 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 14 | 0.36 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 14 | 0.36 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 14 | 0.36 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 17 | 0.36 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 17 | 0.36 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 17 | 0.36 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 18 | 0.36 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 18 | 0.36 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 18 | 0.36 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 19 | 0.36 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 19 | 0.36 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 19 | 0.36 |
| (1,520) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HG2 | 5 | 0.36 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 7 | 0.36 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 17 | 0.36 |
| (1,339) | 1:A:127:SER:HB2 | 1:A:127:SER:HA | 4 | 0.36 |
| (1,339) | 1:A:127:SER:HB2 | 1:A:127:SER:HA | 15 | 0.36 |
| (1,339) | 1:A:127:SER:HB2 | 1:A:127:SER:HA | 18 | 0.36 |
| (1,2248) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:94:ASN:HD22 | 14 | 0.36 |
| (1,209) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HB2 | 17 | 0.36 |
| (1,2005) | 1:A:127:SER:H | 1:A:126:ALA:HA | 4 | 0.36 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 3 | 0.36 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 12 | 0.36 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 14 | 0.36 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 8 | 0.36 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 17 | 0.36 |
| (1,1864) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HG2 | 1 | 0.36 |
| (1,1797) | 1:A:81:LYS:H | 1:A:79:ASN:HB3 | 8 | 0.36 |
| (1,1797) | 1:A:81:LYS:H | 1:A:79:ASN:HB3 | 12 | 0.36 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 4 | 0.36 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 6 | 0.36 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 10 | 0.36 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 10 | 0.36 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 19 | 0.36 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 13 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1534) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG13 | 5 | 0.36 |
| (1,1207) | 1:A:138:ILE:H | 1:A:138:ILE:HG22 | 15 | 0.36 |
| (1,1207) | 1:A:138:ILE:H | 1:A:138:ILE:HG21 | 15 | 0.36 |
| (1,1207) | 1:A:138:ILE:H | 1:A:138:ILE:HG23 | 15 | 0.36 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 9 | 0.36 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 9 | 0.36 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 9 | 0.36 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG22 | 1:A:69:LEU:HB3 | 14 | 0.36 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG21 | 1:A:69:LEU:HB3 | 14 | 0.36 |
| (1,1171) | 1:A:98:ILE:HG23 | 1:A:69:LEU:HB3 | 14 | 0.36 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 12 | 0.36 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 12 | 0.36 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 12 | 0.36 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 5 | 0.35 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 5 | 0.35 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 5 | 0.35 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 18 | 0.35 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 18 | 0.35 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 18 | 0.35 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 20 | 0.35 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 20 | 0.35 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 20 | 0.35 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 7 | 0.35 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 7 | 0.35 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 14 | 0.35 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 14 | 0.35 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 18 | 0.35 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 18 | 0.35 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 14 | 0.35 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 14 | 0.35 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 14 | 0.35 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB2 | 14 | 0.35 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB1 | 14 | 0.35 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB3 | 14 | 0.35 |
| (2,244) | 1:A:95:ASN:HB3 | 1:A:93:LEU:HA | 12 | 0.35 |
| (2,244) | 1:A:95:ASN:HB3 | 1:A:97:SER:HB3 | 12 | 0.35 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 15 | 0.35 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 15 | 0.35 |
| (2,179) | 1:A:45:LYS:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 11 | 0.35 |
| (2,179) | 1:A:45:LYS:HA | 1:A:45:LYS:HG2 | 11 | 0.35 |
| (1,949) | 1:A:87:ILE:HG12 | 1:A:73:MET:HA | 5 | 0.35 |
| (1,949) | 1:A:87:ILE:HG12 | 1:A:73:MET:HA | 10 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 15 | 0.35 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 4 | 0.35 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 4 | 0.35 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 4 | 0.35 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 13 | 0.35 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 13 | 0.35 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 13 | 0.35 |
| (1,336) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:50:SER:HB3 | 10 | 0.35 |
| (1,308) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:118:VAL:HG12 | 11 | 0.35 |
| (1,308) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:118:VAL:HG11 | 11 | 0.35 |
| (1,308) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:118:VAL:HG13 | 11 | 0.35 |
| (1,2338) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:36:ILE:HD12 | 11 | 0.35 |
| (1,2338) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:36:ILE:HD11 | 11 | 0.35 |
| (1,2338) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:36:ILE:HD13 | 11 | 0.35 |
| (1,2338) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:36:ILE:HD12 | 11 | 0.35 |
| (1,2338) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:36:ILE:HD11 | 11 | 0.35 |
| (1,2338) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:36:ILE:HD13 | 11 | 0.35 |
| (1,2338) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:36:ILE:HD12 | 11 | 0.35 |
| (1,2338) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:36:ILE:HD11 | 11 | 0.35 |
| (1,2338) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:36:ILE:HD13 | 11 | 0.35 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 10 | 0.35 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 18 | 0.35 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 18 | 0.35 |
| (1,1893) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:65:ASP:HB2 | 2 | 0.35 |
| (1,1864) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HG2 | 10 | 0.35 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 1 | 0.35 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 4 | 0.35 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 17 | 0.35 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 8 | 0.35 |
| (1,1629) | 1:A:50:SER:H | 1:A:50:SER:HB2 | 17 | 0.35 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 4 | 0.35 |
| (1,1598) | 1:A:26:CYS:H | 1:A:25:GLU:HG3 | 16 | 0.35 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 1 | 0.35 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 18 | 0.34 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 18 | 0.34 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 3 | 0.34 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 3 | 0.34 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 3 | 0.34 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 13 | 0.34 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 13 | 0.34 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 13 | 0.34 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 17 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 17 | 0.34 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 17 | 0.34 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 6 | 0.34 |
| (2,432) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 6 | 0.34 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 2 | 0.34 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 2 | 0.34 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 3 | 0.34 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 3 | 0.34 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 19 | 0.34 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 19 | 0.34 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 15 | 0.34 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 15 | 0.34 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 15 | 0.34 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB2 | 15 | 0.34 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB1 | 15 | 0.34 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB3 | 15 | 0.34 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 2 | 0.34 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 2 | 0.34 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 2 | 0.34 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 2 | 0.34 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 2 | 0.34 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 2 | 0.34 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 13 | 0.34 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 13 | 0.34 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 13 | 0.34 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.34 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.34 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.34 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.34 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 2 | 0.34 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 9 | 0.34 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 9 | 0.34 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 4 | 0.34 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 4 | 0.34 |
| (1,986) | 1:A:62:PRO:HG2 | 1:A:62:PRO:HA | 19 | 0.34 |
| (1,802) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:57:GLU:HA | 9 | 0.34 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 7 | 0.34 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 7 | 0.34 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 7 | 0.34 |
| (1,591) | 1:A:141:ALA:HA | 1:A:142:GLN:HB2 | 1 | 0.34 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 1 | 0.34 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 2 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 4 | 0.34 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 5 | 0.34 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 6 | 0.34 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 7 | 0.34 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 8 | 0.34 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 9 | 0.34 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 10 | 0.34 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 11 | 0.34 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 12 | 0.34 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 14 | 0.34 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 15 | 0.34 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 16 | 0.34 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 17 | 0.34 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 18 | 0.34 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 19 | 0.34 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 20 | 0.34 |
| (1,352) | 1:A:11:SER:HB2 | 1:A:12:ALA:H | 4 | 0.34 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 3 | 0.34 |
| (1,2050) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 12 | 0.34 |
| (1,2050) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 19 | 0.34 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 1 | 0.34 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 11 | 0.34 |
| (1,1961) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 20 | 0.34 |
| (1,1955) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:72:ASN:HB3 | 9 | 0.34 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 7 | 0.34 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 5 | 0.34 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 18 | 0.34 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 4 | 0.34 |
| (1,1432) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HB2 | 16 | 0.34 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 16 | 0.33 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 16 | 0.33 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 16 | 0.33 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 16 | 0.33 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 16 | 0.33 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 16 | 0.33 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 17 | 0.33 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 17 | 0.33 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 17 | 0.33 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 17 | 0.33 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 17 | 0.33 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 17 | 0.33 |
| (2,67) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:59:LEU:HG | 9 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,67) | 1:A:61:TYR:HE2 | 1:A:59:LEU:HG | 9 | 0.33 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 2 | 0.33 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 2 | 0.33 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 2 | 0.33 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 7 | 0.33 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 7 | 0.33 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 7 | 0.33 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 8 | 0.33 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 8 | 0.33 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 8 | 0.33 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 14 | 0.33 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 14 | 0.33 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 14 | 0.33 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 7 | 0.33 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 7 | 0.33 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 1 | 0.33 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 1 | 0.33 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 7 | 0.33 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 7 | 0.33 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 18 | 0.33 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 18 | 0.33 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 18 | 0.33 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 18 | 0.33 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 18 | 0.33 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 18 | 0.33 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 18 | 0.33 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 18 | 0.33 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 18 | 0.33 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 15 | 0.33 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 15 | 0.33 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 15 | 0.33 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 15 | 0.33 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 15 | 0.33 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 15 | 0.33 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 20 | 0.33 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 20 | 0.33 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 4 | 0.33 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 4 | 0.33 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 19 | 0.33 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 19 | 0.33 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 5 | 0.33 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 5 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 7 | 0.33 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 7 | 0.33 |
| (1,949) | 1:A:87:ILE:HG12 | 1:A:73:MET:HA | 9 | 0.33 |
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 3 | 0.33 |
| (1,802) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:57:GLU:HA | 19 | 0.33 |
| (1,762) | 1:A:106:ASN:HB3 | 1:A:85:PHE:HE1 | 16 | 0.33 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 6 | 0.33 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 9 | 0.33 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 9 | 0.33 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 9 | 0.33 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 3 | 0.33 |
| (1,465) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HB2 | 13 | 0.33 |
| (1,339) | 1:A:127:SER:HB2 | 1:A:127:SER:HA | 8 | 0.33 |
| (1,336) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:50:SER:HB3 | 16 | 0.33 |
| (1,2248) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:94:ASN:HD22 | 11 | 0.33 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 12 | 0.33 |
| (1,2050) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 2 | 0.33 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 5 | 0.33 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 19 | 0.33 |
| (1,1722) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:49:GLN:HE21 | 2 | 0.33 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 5 | 0.33 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 9 | 0.33 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 7 | 0.33 |
| (1,1689) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:52:PHE:HB2 | 6 | 0.33 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 14 | 0.33 |
| (1,1632) | 1:A:50:SER:H | 1:A:49:GLN:HB2 | 13 | 0.33 |
| (1,1629) | 1:A:50:SER:H | 1:A:50:SER:HB2 | 10 | 0.33 |
| (1,1629) | 1:A:50:SER:H | 1:A:50:SER:HB2 | 16 | 0.33 |
| (1,1041) | 1:A:74:ARG:HG3 | 1:A:75:PHE:H | 20 | 0.33 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 1 | 0.32 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 1 | 0.32 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 1 | 0.32 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 1 | 0.32 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 1 | 0.32 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 1 | 0.32 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 3 | 0.32 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 3 | 0.32 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 3 | 0.32 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 3 | 0.32 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 3 | 0.32 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 3 | 0.32 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 12 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 12 | 0.32 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 12 | 0.32 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 12 | 0.32 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 12 | 0.32 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 12 | 0.32 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 13 | 0.32 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 13 | 0.32 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 19 | 0.32 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 19 | 0.32 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 19 | 0.32 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 5 | 0.32 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 5 | 0.32 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 12 | 0.32 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 12 | 0.32 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 17 | 0.32 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 17 | 0.32 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 18 | 0.32 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 18 | 0.32 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 4 | 0.32 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 4 | 0.32 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 4 | 0.32 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD12 | 4 | 0.32 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD11 | 4 | 0.32 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD13 | 4 | 0.32 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 9 | 0.32 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 9 | 0.32 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 16 | 0.32 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 16 | 0.32 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 17 | 0.32 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 17 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 6 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 6 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 6 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 6 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 6 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 6 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 6 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 6 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 6 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 11 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 11 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 11 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 11 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 11 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 11 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 11 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 11 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 11 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 12 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 12 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 12 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 12 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 12 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 12 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 12 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 12 | 0.32 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 12 | 0.32 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 1 | 0.32 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 1 | 0.32 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 1 | 0.32 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.32 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.32 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.32 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 15 | 0.32 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 15 | 0.32 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 15 | 0.32 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.32 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.32 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.32 |
| (2,259) | 1:A:140:GLU:HG3 | 1:A:140:GLU:HA | 11 | 0.32 |
| (2,259) | 1:A:140:GLU:HG2 | 1:A:140:GLU:HA | 11 | 0.32 |
| (2,259) | 1:A:140:GLU:HG3 | 1:A:140:GLU:HA | 13 | 0.32 |
| (2,259) | 1:A:140:GLU:HG2 | 1:A:140:GLU:HA | 13 | 0.32 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 17 | 0.32 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 17 | 0.32 |
| (2,244) | 1:A:95:ASN:HB3 | 1:A:93:LEU:HA | 4 | 0.32 |
| (2,244) | 1:A:95:ASN:HB3 | 1:A:97:SER:HB3 | 4 | 0.32 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 13 | 0.32 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 13 | 0.32 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 16 | 0.32 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 16 | 0.32 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.32 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 20 | 0.32 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 1 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 1 | 0.32 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 1 | 0.32 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 5 | 0.32 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 5 | 0.32 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 5 | 0.32 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 7 | 0.32 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 7 | 0.32 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 8 | 0.32 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 8 | 0.32 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 11 | 0.32 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 11 | 0.32 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 18 | 0.32 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 18 | 0.32 |
| (1,936) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:124:GLU:H | 20 | 0.32 |
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 10 | 0.32 |
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 17 | 0.32 |
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 19 | 0.32 |
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 20 | 0.32 |
| (1,802) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:57:GLU:HA | 6 | 0.32 |
| (1,785) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HG2 | 5 | 0.32 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 2 | 0.32 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 4 | 0.32 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 6 | 0.32 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 9 | 0.32 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 13 | 0.32 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 15 | 0.32 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 20 | 0.32 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 1 | 0.32 |
| (1,2078) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:85:PHE:H | 7 | 0.32 |
| (1,2078) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:85:PHE:H | 19 | 0.32 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 2 | 0.32 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 3 | 0.32 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 7 | 0.32 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 12 | 0.32 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 13 | 0.32 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 16 | 0.32 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 4 | 0.32 |
| (1,1864) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HG2 | 8 | 0.32 |
| (1,1864) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HG2 | 12 | 0.32 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 12 | 0.32 |
| (1,1689) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:52:PHE:HB2 | 20 | 0.32 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 9 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 10 | 0.32 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 18 | 0.32 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 2 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 2 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 2 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 2 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 2 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 2 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 10 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 10 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 10 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 10 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 10 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 10 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 14 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 14 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 14 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 14 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 14 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 14 | 0.31 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 12 | 0.31 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 12 | 0.31 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 14 | 0.31 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 14 | 0.31 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 15 | 0.31 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 15 | 0.31 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 1 | 0.31 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 1 | 0.31 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 1 | 0.31 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 11 | 0.31 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 11 | 0.31 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 11 | 0.31 |
| (2,534) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HB3 | 13 | 0.31 |
| (2,534) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:21:LEU:HG | 13 | 0.31 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 1 | 0.31 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 1 | 0.31 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 9 | 0.31 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 9 | 0.31 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 13 | 0.31 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 13 | 0.31 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 20 | 0.31 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 20 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 3 | 0.31 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 3 | 0.31 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 15 | 0.31 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 15 | 0.31 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 9 | 0.31 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 9 | 0.31 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 9 | 0.31 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 9 | 0.31 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 9 | 0.31 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 9 | 0.31 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 9 | 0.31 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 9 | 0.31 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 9 | 0.31 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:92:CYS:HB3 | 5 | 0.31 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:92:CYS:HB3 | 5 | 0.31 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:92:CYS:HB3 | 5 | 0.31 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HB2 | 5 | 0.31 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HB2 | 5 | 0.31 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HB2 | 5 | 0.31 |
| (2,259) | 1:A:140:GLU:HG3 | 1:A:140:GLU:HA | 9 | 0.31 |
| (2,259) | 1:A:140:GLU:HG2 | 1:A:140:GLU:HA | 9 | 0.31 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 17 | 0.31 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 17 | 0.31 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 17 | 0.31 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 17 | 0.31 |
| (1,867) | 1:A:143:LYS:HB2 | 1:A:143:LYS:HA | 17 | 0.31 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 1 | 0.31 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 3 | 0.31 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 5 | 0.31 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 7 | 0.31 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 8 | 0.31 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 10 | 0.31 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 11 | 0.31 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 12 | 0.31 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 14 | 0.31 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 16 | 0.31 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 17 | 0.31 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 18 | 0.31 |
| (1,65) | 1:A:112:PHE:HD1 | 1:A:112:PHE:HB3 | 19 | 0.31 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 2 | 0.31 |
| (1,331) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:104:ASN:HB3 | 10 | 0.31 |
| (1,306) | 1:A:118:VAL:HA | 1:A:121:ARG:HB3 | 6 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 2 | 0.31 |
| (1,2107) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:49:GLN:HG2 | 14 | 0.31 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 1 | 0.31 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 4 | 0.31 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 6 | 0.31 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 8 | 0.31 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 10 | 0.31 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 11 | 0.31 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 14 | 0.31 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 19 | 0.31 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 20 | 0.31 |
| (1,1864) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HG2 | 7 | 0.31 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 3 | 0.31 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 6 | 0.31 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 8 | 0.31 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 10 | 0.31 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 11 | 0.31 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 13 | 0.31 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 15 | 0.31 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 16 | 0.31 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 19 | 0.31 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 8 | 0.31 |
| (1,1689) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:52:PHE:HB2 | 9 | 0.31 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 11 | 0.31 |
| (1,1455) | 1:A:141:ALA:H | 1:A:140:GLU:HB3 | 9 | 0.31 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 11 | 0.31 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 11 | 0.31 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 11 | 0.31 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 17 | 0.31 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 17 | 0.31 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 17 | 0.31 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 20 | 0.31 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 20 | 0.31 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 20 | 0.31 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 8 | 0.3 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 8 | 0.3 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 8 | 0.3 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 8 | 0.3 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 8 | 0.3 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 8 | 0.3 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 20 | 0.3 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 20 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 20 | 0.3 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 20 | 0.3 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 20 | 0.3 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 20 | 0.3 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 4 | 0.3 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 4 | 0.3 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 9 | 0.3 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 9 | 0.3 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 19 | 0.3 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 19 | 0.3 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:59:LEU:HA | 9 | 0.3 |
| (2,65) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:102:TYR:HA | 9 | 0.3 |
| (2,65) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:59:LEU:HA | 9 | 0.3 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 10 | 0.3 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 10 | 0.3 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 8 | 0.3 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 8 | 0.3 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 10 | 0.3 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 10 | 0.3 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 10 | 0.3 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 11 | 0.3 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 11 | 0.3 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 3 | 0.3 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 3 | 0.3 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 3 | 0.3 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 3 | 0.3 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 11 | 0.3 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 11 | 0.3 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 3 | 0.3 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 3 | 0.3 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 4 | 0.3 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 4 | 0.3 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 6 | 0.3 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 6 | 0.3 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 20 | 0.3 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 20 | 0.3 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD22 | 6 | 0.3 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD21 | 6 | 0.3 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD23 | 6 | 0.3 |
| (1,949) | 1:A:87:ILE:HG12 | 1:A:73:MET:HA | 19 | 0.3 |
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 12 | 0.3 |
| (1,808) | 1:A:145:GLU:HG3 | 1:A:145:GLU:HA | 13 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,713) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 13 | 0.3 |
| (1,57) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:118:VAL:HG12 | 11 | 0.3 |
| (1,57) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:118:VAL:HG11 | 11 | 0.3 |
| (1,57) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:118:VAL:HG13 | 11 | 0.3 |
| (1,520) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HG2 | 7 | 0.3 |
| (1,352) | 1:A:11:SER:HB2 | 1:A:12:ALA:H | 19 | 0.3 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 4 | 0.3 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 4 | 0.3 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 4 | 0.3 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 4 | 0.3 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 4 | 0.3 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 4 | 0.3 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 4 | 0.3 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 4 | 0.3 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 4 | 0.3 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 1 | 0.3 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 6 | 0.3 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 7 | 0.3 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 9 | 0.3 |
| (1,2107) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:49:GLN:HG2 | 1 | 0.3 |
| (1,2078) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:85:PHE:H | 13 | 0.3 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 5 | 0.3 |
| (1,1935) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:76:LYS:HB3 | 15 | 0.3 |
| (1,1864) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HG2 | 18 | 0.3 |
| (1,1857) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 7 | 0.3 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 1 | 0.3 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 17 | 0.3 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 18 | 0.3 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 20 | 0.3 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 12 | 0.3 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 3 | 0.3 |
| (1,1629) | 1:A:50:SER:H | 1:A:50:SER:HB2 | 18 | 0.3 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 11 | 0.3 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 6 | 0.3 |
| (1,1531) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 10 | 0.3 |
| (1,1454) | 1:A:141:ALA:H | 1:A:140:GLU:HA | 4 | 0.3 |
| (1,1276) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:72:ASN:HB3 | 19 | 0.3 |
| (1,1276) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:72:ASN:HB3 | 19 | 0.3 |
| (1,1276) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:72:ASN:HB3 | 19 | 0.3 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 18 | 0.29 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 18 | 0.29 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 18 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 18 | 0.29 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 18 | 0.29 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 18 | 0.29 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 11 | 0.29 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 11 | 0.29 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 8 | 0.29 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 8 | 0.29 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 11 | 0.29 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 11 | 0.29 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 14 | 0.29 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 14 | 0.29 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 16 | 0.29 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 16 | 0.29 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 10 | 0.29 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 10 | 0.29 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 2 | 0.29 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 2 | 0.29 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 2 | 0.29 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 11 | 0.29 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 11 | 0.29 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 11 | 0.29 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB2 | 11 | 0.29 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB1 | 11 | 0.29 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB3 | 11 | 0.29 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 13 | 0.29 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 13 | 0.29 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:92:CYS:HB3 | 19 | 0.29 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:92:CYS:HB3 | 19 | 0.29 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:92:CYS:HB3 | 19 | 0.29 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HB2 | 19 | 0.29 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HB2 | 19 | 0.29 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HB2 | 19 | 0.29 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 16 | 0.29 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 16 | 0.29 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 16 | 0.29 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 16 | 0.29 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 16 | 0.29 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 16 | 0.29 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 15 | 0.29 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 15 | 0.29 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 3 | 0.29 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 3 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 9 | 0.29 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 9 | 0.29 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 9 | 0.29 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 2 | 0.29 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 2 | 0.29 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 5 | 0.29 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 5 | 0.29 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 9 | 0.29 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 9 | 0.29 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 12 | 0.29 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 12 | 0.29 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 16 | 0.29 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 16 | 0.29 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE2 | 1:A:138:ILE:HB | 11 | 0.29 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE1 | 1:A:138:ILE:HB | 11 | 0.29 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 9 | 0.29 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 9 | 0.29 |
| (1,911) | 1:A:145:GLU:HB3 | 1:A:145:GLU:H | 5 | 0.29 |
| (1,908) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:34:ASP:HB3 | 8 | 0.29 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 2 | 0.29 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 7 | 0.29 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD22 | 15 | 0.29 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD21 | 15 | 0.29 |
| (1,60) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:122:LEU:HD23 | 15 | 0.29 |
| (1,527) | 1:A:145:GLU:HA | 1:A:146:TRP:HB3 | 1 | 0.29 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 16 | 0.29 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 17 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 3 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 3 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 3 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 3 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 3 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 3 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 3 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 3 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 3 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 14 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 14 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 14 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 14 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 14 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 14 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 14 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 14 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 14 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 15 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 15 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 15 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 15 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 15 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 15 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 15 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 15 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 15 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 16 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 16 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 16 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 16 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 16 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 16 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 16 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 16 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 16 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 18 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 18 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 18 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 18 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 18 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 18 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 18 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 18 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 18 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 19 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 19 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 19 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 19 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 19 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 19 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 19 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 19 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 19 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 20 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 20 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 20 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 20 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 20 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 20 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 20 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 20 | 0.29 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 20 | 0.29 |
| (1,2248) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:94:ASN:HD22 | 8 | 0.29 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 6 | 0.29 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 6 | 0.29 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 6 | 0.29 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 8 | 0.29 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 19 | 0.29 |
| (1,2107) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:49:GLN:HG2 | 10 | 0.29 |
| (1,2107) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:49:GLN:HG2 | 16 | 0.29 |
| (1,2078) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:85:PHE:H | 1 | 0.29 |
| (1,2078) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:85:PHE:H | 4 | 0.29 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 9 | 0.29 |
| (1,1922) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 1 | 0.29 |
| (1,1922) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 17 | 0.29 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 5 | 0.29 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 9 | 0.29 |
| (1,1864) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HG2 | 4 | 0.29 |
| (1,1864) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HG2 | 6 | 0.29 |
| (1,1797) | 1:A:81:LYS:H | 1:A:79:ASN:HB3 | 14 | 0.29 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 7 | 0.29 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 10 | 0.29 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 11 | 0.29 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 12 | 0.29 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 2 | 0.29 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 18 | 0.29 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 4 | 0.29 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 5 | 0.29 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 10 | 0.29 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 12 | 0.29 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 15 | 0.29 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 17 | 0.29 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 19 | 0.29 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 20 | 0.29 |
| (1,1601) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:13:GLY:HA2 | 14 | 0.29 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 7 | 0.29 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 16 | 0.29 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HA | 4 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HA | 4 | 0.29 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HA | 4 | 0.29 |
| (1,1276) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:72:ASN:HB3 | 10 | 0.29 |
| (1,1276) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:72:ASN:HB3 | 10 | 0.29 |
| (1,1276) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:72:ASN:HB3 | 10 | 0.29 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HA | 2 | 0.29 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HA | 2 | 0.29 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HA | 2 | 0.29 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 8 | 0.29 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 8 | 0.29 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 8 | 0.29 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 11 | 0.29 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 11 | 0.29 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 11 | 0.29 |
| (1,1041) | 1:A:74:ARG:HG3 | 1:A:75:PHE:H | 17 | 0.29 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 6 | 0.28 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 6 | 0.28 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 15 | 0.28 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 15 | 0.28 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 19 | 0.28 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 19 | 0.28 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 14 | 0.28 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 14 | 0.28 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 17 | 0.28 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 17 | 0.28 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 18 | 0.28 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 18 | 0.28 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 20 | 0.28 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 20 | 0.28 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 4 | 0.28 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 4 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 8 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 8 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 8 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 8 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 8 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 8 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 8 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 8 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 8 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 16 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 16 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 16 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 16 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 16 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 16 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 16 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 16 | 0.28 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 16 | 0.28 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 3 | 0.28 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 3 | 0.28 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 10 | 0.28 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 10 | 0.28 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 10 | 0.28 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 10 | 0.28 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 10 | 0.28 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 10 | 0.28 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 8 | 0.28 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 8 | 0.28 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 9 | 0.28 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 9 | 0.28 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 18 | 0.28 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 18 | 0.28 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 12 | 0.28 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 12 | 0.28 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 12 | 0.28 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.28 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.28 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.28 |
| (2,259) | 1:A:140:GLU:HG3 | 1:A:140:GLU:HA | 1 | 0.28 |
| (2,259) | 1:A:140:GLU:HG2 | 1:A:140:GLU:HA | 1 | 0.28 |
| (2,190) | 1:A:148:GLU:HA | 1:A:148:GLU:HG2 | 9 | 0.28 |
| (2,190) | 1:A:148:GLU:HA | 1:A:148:GLU:HG3 | 9 | 0.28 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 7 | 0.28 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 7 | 0.28 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 12 | 0.28 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 12 | 0.28 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 6 | 0.28 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 6 | 0.28 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 6 | 0.28 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 14 | 0.28 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 14 | 0.28 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 15 | 0.28 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 15 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 17 | 0.28 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 17 | 0.28 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 18 | 0.28 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 18 | 0.28 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE2 | 1:A:138:ILE:HB | 1 | 0.28 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE1 | 1:A:138:ILE:HB | 1 | 0.28 |
| (1,949) | 1:A:87:ILE:HG12 | 1:A:73:MET:HA | 11 | 0.28 |
| (1,937) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:123:PHE:H | 20 | 0.28 |
| (1,897) | 1:A:118:VAL:HB | 1:A:115:VAL:HA | 11 | 0.28 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 1 | 0.28 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 10 | 0.28 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 16 | 0.28 |
| (1,713) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 8 | 0.28 |
| (1,689) | 1:A:104:ASN:HB2 | 1:A:107:GLN:HE22 | 19 | 0.28 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 4 | 0.28 |
| (1,352) | 1:A:11:SER:HB2 | 1:A:12:ALA:H | 18 | 0.28 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 1 | 0.28 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 3 | 0.28 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 5 | 0.28 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 6 | 0.28 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 7 | 0.28 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 8 | 0.28 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 10 | 0.28 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 14 | 0.28 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 15 | 0.28 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 18 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 2 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 2 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 2 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 2 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 2 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 2 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 2 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 2 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 2 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 5 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 5 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 5 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 5 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 5 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 5 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 5 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 5 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 5 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 12 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 12 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 12 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 12 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 12 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 12 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 12 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 12 | 0.28 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 12 | 0.28 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 15 | 0.28 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 16 | 0.28 |
| (1,2078) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:85:PHE:H | 15 | 0.28 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 17 | 0.28 |
| (1,1955) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:72:ASN:HB3 | 5 | 0.28 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 6 | 0.28 |
| (1,1864) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HG2 | 20 | 0.28 |
| (1,1854) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HG | 20 | 0.28 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 4 | 0.28 |
| (1,1715) | 1:A:73:MET:H | 1:A:73:MET:HB3 | 14 | 0.28 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 2 | 0.28 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 6 | 0.28 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 7 | 0.28 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 9 | 0.28 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 11 | 0.28 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 16 | 0.28 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 18 | 0.28 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 8 | 0.28 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 15 | 0.28 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 3 | 0.28 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 15 | 0.28 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 19 | 0.28 |
| (1,1454) | 1:A:141:ALA:H | 1:A:140:GLU:HA | 9 | 0.28 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 15 | 0.28 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 15 | 0.28 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 15 | 0.28 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 20 | 0.28 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 20 | 0.28 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 20 | 0.28 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 14 | 0.28 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 14 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 14 | 0.28 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 19 | 0.27 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 19 | 0.27 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 19 | 0.27 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 19 | 0.27 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 19 | 0.27 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 19 | 0.27 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 3 | 0.27 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 3 | 0.27 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 10 | 0.27 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 10 | 0.27 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 0.27 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 0.27 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG21 | 16 | 0.27 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG22 | 16 | 0.27 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG23 | 16 | 0.27 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG21 | 16 | 0.27 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG22 | 16 | 0.27 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG23 | 16 | 0.27 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 2 | 0.27 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 2 | 0.27 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 4 | 0.27 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 4 | 0.27 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 13 | 0.27 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 13 | 0.27 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 16 | 0.27 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 16 | 0.27 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 19 | 0.27 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 19 | 0.27 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 1 | 0.27 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 1 | 0.27 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 1 | 0.27 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 1 | 0.27 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 1 | 0.27 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 17 | 0.27 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 17 | 0.27 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 17 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 7 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 7 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 7 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 7 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 7 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 7 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 7 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 7 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 7 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 10 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 10 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 10 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 10 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 10 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 10 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 10 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 10 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 10 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 20 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 20 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 20 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 20 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 20 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 20 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 20 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 20 | 0.27 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 20 | 0.27 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 2 | 0.27 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 2 | 0.27 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 14 | 0.27 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 14 | 0.27 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 20 | 0.27 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 20 | 0.27 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 6 | 0.27 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 6 | 0.27 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 6 | 0.27 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 6 | 0.27 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 6 | 0.27 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 6 | 0.27 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 3 | 0.27 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 3 | 0.27 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 3 | 0.27 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 3 | 0.27 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 3 | 0.27 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 3 | 0.27 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 3 | 0.27 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 3 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 3 | 0.27 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 3 | 0.27 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 3 | 0.27 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 3 | 0.27 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 10 | 0.27 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 10 | 0.27 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 12 | 0.27 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 12 | 0.27 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 16 | 0.27 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 16 | 0.27 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 17 | 0.27 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 17 | 0.27 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 16 | 0.27 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 16 | 0.27 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 16 | 0.27 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.27 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.27 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.27 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 18 | 0.27 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 18 | 0.27 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 18 | 0.27 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 18 | 0.27 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 18 | 0.27 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 18 | 0.27 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 4 | 0.27 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 4 | 0.27 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 4 | 0.27 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 4 | 0.27 |
| (2,190) | 1:A:148:GLU:HA | 1:A:148:GLU:HG2 | 13 | 0.27 |
| (2,190) | 1:A:148:GLU:HA | 1:A:148:GLU:HG3 | 13 | 0.27 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG3 | 19 | 0.27 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG2 | 19 | 0.27 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 1 | 0.27 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 1 | 0.27 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 10 | 0.27 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 10 | 0.27 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 15 | 0.27 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 15 | 0.27 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 18 | 0.27 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 18 | 0.27 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 18 | 0.27 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 18 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 18 | 0.27 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 13 | 0.27 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 13 | 0.27 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD22 | 20 | 0.27 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD21 | 20 | 0.27 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD23 | 20 | 0.27 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD22 | 20 | 0.27 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD21 | 20 | 0.27 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD23 | 20 | 0.27 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD22 | 20 | 0.27 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD21 | 20 | 0.27 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD23 | 20 | 0.27 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD22 | 20 | 0.27 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD21 | 20 | 0.27 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD23 | 20 | 0.27 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD22 | 20 | 0.27 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD21 | 20 | 0.27 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD23 | 20 | 0.27 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD22 | 20 | 0.27 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD21 | 20 | 0.27 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD23 | 20 | 0.27 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE2 | 1:A:138:ILE:HB | 13 | 0.27 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE1 | 1:A:138:ILE:HB | 13 | 0.27 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 19 | 0.27 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 19 | 0.27 |
| (1,808) | 1:A:145:GLU:HG3 | 1:A:145:GLU:HA | 2 | 0.27 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 20 | 0.27 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 20 | 0.27 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 20 | 0.27 |
| (1,644) | 1:A:135:LEU:HB2 | 1:A:136:ASN:H | 4 | 0.27 |
| (1,591) | 1:A:141:ALA:HA | 1:A:142:GLN:HB2 | 5 | 0.27 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 15 | 0.27 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 18 | 0.27 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 11 | 0.27 |
| (1,352) | 1:A:11:SER:HB2 | 1:A:12:ALA:H | 20 | 0.27 |
| (1,319) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HB2 | 11 | 0.27 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 2 | 0.27 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 4 | 0.27 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 13 | 0.27 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 19 | 0.27 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 20 | 0.27 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 8 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 8 | 0.27 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 8 | 0.27 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 8 | 0.27 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 8 | 0.27 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 8 | 0.27 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 8 | 0.27 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 8 | 0.27 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 8 | 0.27 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 13 | 0.27 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 13 | 0.27 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 13 | 0.27 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 13 | 0.27 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 13 | 0.27 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 13 | 0.27 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 13 | 0.27 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 13 | 0.27 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 13 | 0.27 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 2 | 0.27 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 2 | 0.27 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 2 | 0.27 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 15 | 0.27 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 15 | 0.27 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 15 | 0.27 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 16 | 0.27 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 16 | 0.27 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 16 | 0.27 |
| (1,2107) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:49:GLN:HG2 | 2 | 0.27 |
| (1,2107) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:49:GLN:HG2 | 19 | 0.27 |
| (1,2078) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:85:PHE:H | 10 | 0.27 |
| (1,2078) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:85:PHE:H | 16 | 0.27 |
| (1,2064) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HG3 | 15 | 0.27 |
| (1,1908) | 1:A:70:VAL:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 11 | 0.27 |
| (1,1864) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HG2 | 17 | 0.27 |
| (1,1855) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HD12 | 18 | 0.27 |
| (1,1855) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HD11 | 18 | 0.27 |
| (1,1855) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HD13 | 18 | 0.27 |
| (1,1722) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:49:GLN:HE21 | 13 | 0.27 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 3 | 0.27 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 1 | 0.27 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 8 | 0.27 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 14 | 0.27 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 10 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 18 | 0.27 |
| (1,1556) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 20 | 0.27 |
| (1,1532) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 8 | 0.27 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 20 | 0.27 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 20 | 0.27 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 20 | 0.27 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HA | 7 | 0.27 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HA | 7 | 0.27 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HA | 7 | 0.27 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HA | 18 | 0.27 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HA | 18 | 0.27 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HA | 18 | 0.27 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HA | 20 | 0.27 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HA | 20 | 0.27 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HA | 20 | 0.27 |
| (1,1253) | 1:A:144:ILE:HD12 | 1:A:144:ILE:HB | 5 | 0.27 |
| (1,1253) | 1:A:144:ILE:HD11 | 1:A:144:ILE:HB | 5 | 0.27 |
| (1,1253) | 1:A:144:ILE:HD13 | 1:A:144:ILE:HB | 5 | 0.27 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 2 | 0.27 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 2 | 0.27 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 2 | 0.27 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 13 | 0.27 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 13 | 0.27 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 13 | 0.27 |
| (1,1042) | 1:A:74:ARG:HG3 | 1:A:74:ARG:HA | 20 | 0.27 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 15 | 0.26 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 15 | 0.26 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 15 | 0.26 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 15 | 0.26 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 15 | 0.26 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 15 | 0.26 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 7 | 0.26 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 7 | 0.26 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 9 | 0.26 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 9 | 0.26 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 12 | 0.26 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 12 | 0.26 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 8 | 0.26 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 8 | 0.26 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 9 | 0.26 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 9 | 0.26 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 5 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 5 | 0.26 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 5 | 0.26 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:H | 13 | 0.26 |
| (2,425) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:19:ASN:HD22 | 13 | 0.26 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HG3 | 4 | 0.26 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 4 | 0.26 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 4 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 13 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 13 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 13 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 13 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 13 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 13 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 13 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 13 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 13 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 14 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 14 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 14 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 14 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 14 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 14 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 14 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 14 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 14 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 19 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 19 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 19 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 19 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 19 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 19 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 19 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 19 | 0.26 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 19 | 0.26 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 11 | 0.26 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 11 | 0.26 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 12 | 0.26 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 12 | 0.26 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 18 | 0.26 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 18 | 0.26 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:121:ARG:HB3 | 4 | 0.26 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:121:ARG:HB3 | 4 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:121:ARG:HB3 | 4 | 0.26 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:36:ILE:HB | 4 | 0.26 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:36:ILE:HB | 4 | 0.26 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:36:ILE:HB | 4 | 0.26 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 4 | 0.26 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 4 | 0.26 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 2 | 0.26 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 2 | 0.26 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 2 | 0.26 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.26 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.26 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.26 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:4:LYS:HA | 10 | 0.26 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:4:LYS:HA | 10 | 0.26 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:4:LYS:HA | 12 | 0.26 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:4:LYS:HA | 12 | 0.26 |
| (2,244) | 1:A:95:ASN:HB3 | 1:A:93:LEU:HA | 1 | 0.26 |
| (2,244) | 1:A:95:ASN:HB3 | 1:A:97:SER:HB3 | 1 | 0.26 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 20 | 0.26 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 20 | 0.26 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 8 | 0.26 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 8 | 0.26 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 8 | 0.26 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 8 | 0.26 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG3 | 17 | 0.26 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG2 | 17 | 0.26 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 3 | 0.26 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 3 | 0.26 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 14 | 0.26 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 14 | 0.26 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 14 | 0.26 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 14 | 0.26 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 14 | 0.26 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 1 | 0.26 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 1 | 0.26 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 19 | 0.26 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 19 | 0.26 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HG22 | 8 | 0.26 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HG21 | 8 | 0.26 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HG23 | 8 | 0.26 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HG22 | 8 | 0.26 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HG21 | 8 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HG23 | 8 | 0.26 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 12 | 0.26 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 12 | 0.26 |
| (1,843) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG2 | 1 | 0.26 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 8 | 0.26 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 13 | 0.26 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 16 | 0.26 |
| (1,805) | 1:A:145:GLU:HG2 | 1:A:145:GLU:HA | 11 | 0.26 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 2 | 0.26 |
| (1,713) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 5 | 0.26 |
| (1,713) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 6 | 0.26 |
| (1,713) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 12 | 0.26 |
| (1,713) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 14 | 0.26 |
| (1,632) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:84:ASN:HB3 | 14 | 0.26 |
| (1,587) | 1:A:24:ASN:HA | 1:A:24:ASN:HB2 | 10 | 0.26 |
| (1,587) | 1:A:24:ASN:HA | 1:A:24:ASN:HB2 | 17 | 0.26 |
| (1,520) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HG2 | 19 | 0.26 |
| (1,352) | 1:A:11:SER:HB2 | 1:A:12:ALA:H | 2 | 0.26 |
| (1,352) | 1:A:11:SER:HB2 | 1:A:12:ALA:H | 3 | 0.26 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 2 | 0.26 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 9 | 0.26 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 12 | 0.26 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 7 | 0.26 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 7 | 0.26 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 7 | 0.26 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 7 | 0.26 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 7 | 0.26 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 7 | 0.26 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 7 | 0.26 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 7 | 0.26 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 7 | 0.26 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 17 | 0.26 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 17 | 0.26 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 17 | 0.26 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 17 | 0.26 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 17 | 0.26 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 17 | 0.26 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 17 | 0.26 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 17 | 0.26 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 17 | 0.26 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 9 | 0.26 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 9 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 9 | 0.26 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 14 | 0.26 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 14 | 0.26 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 14 | 0.26 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 17 | 0.26 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 17 | 0.26 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 17 | 0.26 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 6 | 0.26 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 11 | 0.26 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 20 | 0.26 |
| (1,2078) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:85:PHE:H | 5 | 0.26 |
| (1,2078) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:85:PHE:H | 6 | 0.26 |
| (1,2078) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:85:PHE:H | 8 | 0.26 |
| (1,2078) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:85:PHE:H | 11 | 0.26 |
| (1,2014) | 1:A:104:ASN:HD22 | 1:A:104:ASN:HB3 | 5 | 0.26 |
| (1,2006) | 1:A:127:SER:H | 1:A:127:SER:HB3 | 19 | 0.26 |
| (1,1922) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 4 | 0.26 |
| (1,1922) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 7 | 0.26 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 3 | 0.26 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 15 | 0.26 |
| (1,1864) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HG2 | 5 | 0.26 |
| (1,1799) | 1:A:119:LYS:H | 1:A:118:VAL:HB | 11 | 0.26 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 13 | 0.26 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 2 | 0.26 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 4 | 0.26 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 6 | 0.26 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 18 | 0.26 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 19 | 0.26 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 2 | 0.26 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 20 | 0.26 |
| (1,1689) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:52:PHE:HB2 | 1 | 0.26 |
| (1,1689) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:52:PHE:HB2 | 12 | 0.26 |
| (1,1686) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:54:LEU:HB3 | 13 | 0.26 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 9 | 0.26 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 16 | 0.26 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 5 | 0.26 |
| (1,1552) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:123:PHE:H | 11 | 0.26 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 10 | 0.26 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 10 | 0.26 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 10 | 0.26 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 13 | 0.26 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 13 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 13 | 0.26 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 18 | 0.26 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 18 | 0.26 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 18 | 0.26 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HA | 4 | 0.26 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HA | 4 | 0.26 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HA | 4 | 0.26 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HA | 5 | 0.26 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HA | 5 | 0.26 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HA | 5 | 0.26 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HA | 6 | 0.26 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HA | 6 | 0.26 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HA | 6 | 0.26 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HA | 10 | 0.26 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HA | 10 | 0.26 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HA | 10 | 0.26 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 9 | 0.26 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 9 | 0.26 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 9 | 0.26 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 10 | 0.26 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 10 | 0.26 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 10 | 0.26 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 9 | 0.26 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 9 | 0.26 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 9 | 0.26 |
| (1,1042) | 1:A:74:ARG:HG3 | 1:A:74:ARG:HA | 17 | 0.26 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 13 | 0.25 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 13 | 0.25 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 13 | 0.25 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 13 | 0.25 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 13 | 0.25 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 13 | 0.25 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 8 | 0.25 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 8 | 0.25 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 9 | 0.25 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 9 | 0.25 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG21 | 18 | 0.25 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG22 | 18 | 0.25 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG23 | 18 | 0.25 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG21 | 18 | 0.25 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG22 | 18 | 0.25 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG23 | 18 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG21 | 19 | 0.25 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG22 | 19 | 0.25 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG23 | 19 | 0.25 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG21 | 19 | 0.25 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG22 | 19 | 0.25 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG23 | 19 | 0.25 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 3 | 0.25 |
| (2,519) | 1:A:18:THR:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 3 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 6 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 6 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 20 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 20 | 0.25 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 14 | 0.25 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 14 | 0.25 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 18 | 0.25 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 18 | 0.25 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 4 | 0.25 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 4 | 0.25 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 4 | 0.25 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 1 | 0.25 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 1 | 0.25 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 1 | 0.25 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 1 | 0.25 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 1 | 0.25 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 1 | 0.25 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 1 | 0.25 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 1 | 0.25 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 1 | 0.25 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 17 | 0.25 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 17 | 0.25 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 17 | 0.25 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 17 | 0.25 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 17 | 0.25 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 17 | 0.25 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 17 | 0.25 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 17 | 0.25 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 17 | 0.25 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 7 | 0.25 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 7 | 0.25 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 8 | 0.25 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 8 | 0.25 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 15 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 15 | 0.25 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 17 | 0.25 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 17 | 0.25 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 18 | 0.25 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 18 | 0.25 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 18 | 0.25 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 18 | 0.25 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 18 | 0.25 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 18 | 0.25 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 11 | 0.25 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 11 | 0.25 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 11 | 0.25 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 11 | 0.25 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 11 | 0.25 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 11 | 0.25 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 20 | 0.25 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 20 | 0.25 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 20 | 0.25 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 20 | 0.25 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 20 | 0.25 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 20 | 0.25 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 15 | 0.25 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 15 | 0.25 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 15 | 0.25 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:119:LYS:H | 15 | 0.25 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:119:LYS:H | 15 | 0.25 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:119:LYS:H | 15 | 0.25 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 1 | 0.25 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 1 | 0.25 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 3 | 0.25 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 3 | 0.25 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 3 | 0.25 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.25 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.25 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.25 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 1 | 0.25 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 1 | 0.25 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 8 | 0.25 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 8 | 0.25 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 14 | 0.25 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 14 | 0.25 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 14 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 14 | 0.25 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 14 | 0.25 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 14 | 0.25 |
| (2,145) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:44:ARG:HB3 | 10 | 0.25 |
| (2,145) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:115:VAL:HB | 10 | 0.25 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HG22 | 16 | 0.25 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HG21 | 16 | 0.25 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HG23 | 16 | 0.25 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HG22 | 16 | 0.25 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HG21 | 16 | 0.25 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HG23 | 16 | 0.25 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 8 | 0.25 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 8 | 0.25 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD22 | 17 | 0.25 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD21 | 17 | 0.25 |
| (1,948) | 1:A:45:LYS:HD2 | 1:A:54:LEU:HD23 | 17 | 0.25 |
| (1,935) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:124:GLU:HB2 | 4 | 0.25 |
| (1,836) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 5 | 0.25 |
| (1,821) | 1:A:49:GLN:HG3 | 1:A:49:GLN:HE22 | 14 | 0.25 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 3 | 0.25 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 4 | 0.25 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 5 | 0.25 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 7 | 0.25 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 11 | 0.25 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 17 | 0.25 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 18 | 0.25 |
| (1,805) | 1:A:145:GLU:HG2 | 1:A:145:GLU:HA | 8 | 0.25 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 6 | 0.25 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 6 | 0.25 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 6 | 0.25 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 5 | 0.25 |
| (1,713) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 2 | 0.25 |
| (1,713) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 19 | 0.25 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 9 | 0.25 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 19 | 0.25 |
| (1,632) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:84:ASN:HB3 | 18 | 0.25 |
| (1,587) | 1:A:24:ASN:HA | 1:A:24:ASN:HB2 | 7 | 0.25 |
| (1,552) | 1:A:137:ASP:HA | 1:A:138:ILE:HA | 15 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:142:GLN:HA | 1:A:142:GLN:HB3 | 1 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:142:GLN:HA | 1:A:142:GLN:HB3 | 5 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:142:GLN:HA | 1:A:142:GLN:HB3 | 14 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:142:GLN:HA | 1:A:142:GLN:HB3 | 17 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 3 | 0.25 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 14 | 0.25 |
| (1,370) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:98:ILE:H | 13 | 0.25 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 2 | 0.25 |
| (1,25) | 1:A:75:PHE:HB3 | 1:A:75:PHE:HD1 | 11 | 0.25 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 10 | 0.25 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 10 | 0.25 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 10 | 0.25 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 10 | 0.25 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 10 | 0.25 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 10 | 0.25 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 10 | 0.25 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 10 | 0.25 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 10 | 0.25 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 20 | 0.25 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 20 | 0.25 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 20 | 0.25 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 5 | 0.25 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 7 | 0.25 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 8 | 0.25 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 5 | 0.25 |
| (1,2014) | 1:A:104:ASN:HD22 | 1:A:104:ASN:HB3 | 17 | 0.25 |
| (1,2005) | 1:A:127:SER:H | 1:A:126:ALA:HA | 10 | 0.25 |
| (1,1922) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 2 | 0.25 |
| (1,1922) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 3 | 0.25 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 7 | 0.25 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 10 | 0.25 |
| (1,1740) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HB3 | 5 | 0.25 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 15 | 0.25 |
| (1,1642) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 9 | 0.25 |
| (1,1642) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 19 | 0.25 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 12 | 0.25 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 17 | 0.25 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 8 | 0.25 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 14 | 0.25 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 17 | 0.25 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 13 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 1 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 1 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 1 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 5 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 5 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 5 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 6 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 6 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 6 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 8 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 8 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 8 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 11 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 11 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 11 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 12 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 12 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 12 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 16 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 16 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 16 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 17 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 17 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 17 | 0.25 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HA | 16 | 0.25 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HA | 16 | 0.25 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HA | 16 | 0.25 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:92:CYS:HB2 | 18 | 0.25 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:92:CYS:HB2 | 18 | 0.25 |
| (1,1142) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:92:CYS:HB2 | 18 | 0.25 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:72:ASN:HD21 | 2 | 0.25 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:72:ASN:HD21 | 2 | 0.25 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:72:ASN:HD21 | 2 | 0.25 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 9 | 0.24 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 9 | 0.24 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 5 | 0.24 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 5 | 0.24 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 5 | 0.24 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 5 | 0.24 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 5 | 0.24 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 5 | 0.24 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD12 | 6 | 0.24 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD11 | 6 | 0.24 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:46:ILE:HD13 | 6 | 0.24 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG12 | 6 | 0.24 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG11 | 6 | 0.24 |
| (2,9) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:118:VAL:HG13 | 6 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 1 | 0.24 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 1 | 0.24 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 19 | 0.24 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 19 | 0.24 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 19 | 0.24 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG21 | 9 | 0.24 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG22 | 9 | 0.24 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG23 | 9 | 0.24 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG21 | 9 | 0.24 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG22 | 9 | 0.24 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG23 | 9 | 0.24 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG21 | 17 | 0.24 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG22 | 17 | 0.24 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG23 | 17 | 0.24 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG21 | 17 | 0.24 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG22 | 17 | 0.24 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG23 | 17 | 0.24 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 4 | 0.24 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 4 | 0.24 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 11 | 0.24 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 11 | 0.24 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 6 | 0.24 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 6 | 0.24 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 11 | 0.24 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 11 | 0.24 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 12 | 0.24 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 12 | 0.24 |
| (2,370) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:78:GLU:HG3 | 9 | 0.24 |
| (2,370) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:83:VAL:HB | 9 | 0.24 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 1 | 0.24 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 1 | 0.24 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 19 | 0.24 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 19 | 0.24 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 19 | 0.24 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 19 | 0.24 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 19 | 0.24 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 19 | 0.24 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 9 | 0.24 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 9 | 0.24 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 9 | 0.24 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 9 | 0.24 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 9 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 9 | 0.24 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 13 | 0.24 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 13 | 0.24 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 13 | 0.24 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 13 | 0.24 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 13 | 0.24 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 13 | 0.24 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:121:ARG:HB3 | 19 | 0.24 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:121:ARG:HB3 | 19 | 0.24 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:121:ARG:HB3 | 19 | 0.24 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:36:ILE:HB | 19 | 0.24 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:36:ILE:HB | 19 | 0.24 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:36:ILE:HB | 19 | 0.24 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 2 | 0.24 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 2 | 0.24 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 7 | 0.24 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 7 | 0.24 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 11 | 0.24 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 11 | 0.24 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:4:LYS:HA | 18 | 0.24 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:4:LYS:HA | 18 | 0.24 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 8 | 0.24 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 8 | 0.24 |
| (2,244) | 1:A:95:ASN:HB3 | 1:A:93:LEU:HA | 17 | 0.24 |
| (2,244) | 1:A:95:ASN:HB3 | 1:A:97:SER:HB3 | 17 | 0.24 |
| (2,175) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:98:ILE:HD12 | 17 | 0.24 |
| (2,175) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:98:ILE:HD11 | 17 | 0.24 |
| (2,175) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:98:ILE:HD13 | 17 | 0.24 |
| (2,175) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG12 | 17 | 0.24 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:93:LEU:HB3 | 6 | 0.24 |
| (2,121) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:93:LEU:HB3 | 6 | 0.24 |
| (1,952) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HG12 | 5 | 0.24 |
| (1,952) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HG12 | 9 | 0.24 |
| (1,933) | 1:A:121:ARG:HB2 | 1:A:121:ARG:HD2 | 4 | 0.24 |
| (1,926) | 1:A:140:GLU:H | 1:A:140:GLU:HB2 | 6 | 0.24 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 1 | 0.24 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 6 | 0.24 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 14 | 0.24 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 15 | 0.24 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 20 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:145:GLU:HG3 | 1:A:145:GLU:HA | 7 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:145:GLU:HG3 | 1:A:145:GLU:HA | 14 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,795) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:124:GLU:HG3 | 17 | 0.24 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 4 | 0.24 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 17 | 0.24 |
| (1,713) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 11 | 0.24 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 5 | 0.24 |
| (1,632) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:84:ASN:HB3 | 9 | 0.24 |
| (1,632) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:84:ASN:HB3 | 17 | 0.24 |
| (1,629) | 1:A:135:LEU:HB2 | 1:A:135:LEU:HD12 | 18 | 0.24 |
| (1,629) | 1:A:135:LEU:HB2 | 1:A:135:LEU:HD11 | 18 | 0.24 |
| (1,629) | 1:A:135:LEU:HB2 | 1:A:135:LEU:HD13 | 18 | 0.24 |
| (1,628) | 1:A:17:LEU:HB3 | 1:A:14:LEU:HA | 8 | 0.24 |
| (1,591) | 1:A:141:ALA:HA | 1:A:142:GLN:HB2 | 14 | 0.24 |
| (1,530) | 1:A:142:GLN:HA | 1:A:142:GLN:HB3 | 20 | 0.24 |
| (1,520) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HG2 | 10 | 0.24 |
| (1,480) | 1:A:140:GLU:H | 1:A:139:PHE:HA | 2 | 0.24 |
| (1,475) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:35:GLU:HA | 4 | 0.24 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 10 | 0.24 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 10 | 0.24 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 10 | 0.24 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 10 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 1 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 1 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 1 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 1 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 1 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 1 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 1 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 1 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 1 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 6 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 6 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 6 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 6 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 6 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 6 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 6 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 6 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 6 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD12 | 11 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD11 | 11 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:59:LEU:HD13 | 11 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 11 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 11 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 11 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD12 | 11 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD11 | 11 | 0.24 |
| (1,2332) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:59:LEU:HD13 | 11 | 0.24 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 3 | 0.24 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 3 | 0.24 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 3 | 0.24 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 4 | 0.24 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 4 | 0.24 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 4 | 0.24 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 7 | 0.24 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 7 | 0.24 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 7 | 0.24 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 13 | 0.24 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 13 | 0.24 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 13 | 0.24 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 18 | 0.24 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 18 | 0.24 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 18 | 0.24 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 3 | 0.24 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 3 | 0.24 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 3 | 0.24 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 3 | 0.24 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 3 | 0.24 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 4 | 0.24 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 6 | 0.24 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 19 | 0.24 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 10 | 0.24 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 10 | 0.24 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 10 | 0.24 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 20 | 0.24 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 20 | 0.24 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 20 | 0.24 |
| (1,2116) | 1:A:113:ASN:HD21 | 1:A:81:LYS:HB3 | 12 | 0.24 |
| (1,2078) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:85:PHE:H | 3 | 0.24 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 10 | 0.24 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 10 | 0.24 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 10 | 0.24 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 19 | 0.24 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 19 | 0.24 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 19 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 6 | 0.24 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 6 | 0.24 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 6 | 0.24 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 11 | 0.24 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 11 | 0.24 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 11 | 0.24 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 18 | 0.24 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 18 | 0.24 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 18 | 0.24 |
| (1,2014) | 1:A:104:ASN:HD22 | 1:A:104:ASN:HB3 | 4 | 0.24 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 16 | 0.24 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 18 | 0.24 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 7 | 0.24 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 11 | 0.24 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 18 | 0.24 |
| (1,1857) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB2 | 10 | 0.24 |
| (1,1797) | 1:A:81:LYS:H | 1:A:79:ASN:HB3 | 3 | 0.24 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 13 | 0.24 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 14 | 0.24 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 16 | 0.24 |
| (1,1740) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HB3 | 19 | 0.24 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 13 | 0.24 |
| (1,1661) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 17 | 0.24 |
| (1,1642) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 14 | 0.24 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 4 | 0.24 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 6 | 0.24 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 11 | 0.24 |
| (1,1573) | 1:A:43:LYS:H | 1:A:43:LYS:HB2 | 20 | 0.24 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 15 | 0.24 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 17 | 0.24 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 14 | 0.24 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 14 | 0.24 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 14 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 3 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 3 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 3 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 4 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 4 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 4 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 7 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 7 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 7 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 9 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 9 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 9 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 14 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 14 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 14 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 15 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 15 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 15 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 19 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 19 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 19 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 20 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 20 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 20 | 0.24 |
| (1,1276) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:72:ASN:HB3 | 6 | 0.24 |
| (1,1276) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:72:ASN:HB3 | 6 | 0.24 |
| (1,1276) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:72:ASN:HB3 | 6 | 0.24 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 12 | 0.24 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 12 | 0.24 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 12 | 0.24 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 17 | 0.24 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 17 | 0.24 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 17 | 0.24 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 16 | 0.24 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 16 | 0.24 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 16 | 0.24 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD3 | 15 | 0.24 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD3 | 15 | 0.24 |
| (1,1144) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD3 | 15 | 0.24 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:72:ASN:HD21 | 8 | 0.24 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:72:ASN:HD21 | 8 | 0.24 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:72:ASN:HD21 | 8 | 0.24 |
| (1,1035) | 1:A:74:ARG:HG2 | 1:A:74:ARG:HA | 16 | 0.24 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 6 | 0.24 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 5 | 0.23 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 5 | 0.23 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 7 | 0.23 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 7 | 0.23 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 18 | 0.23 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 18 | 0.23 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 18 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 2 | 0.23 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 2 | 0.23 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 2 | 0.23 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 2 | 0.23 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 2 | 0.23 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 2 | 0.23 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 2 | 0.23 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 2 | 0.23 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 2 | 0.23 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 2 | 0.23 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 2 | 0.23 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 2 | 0.23 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 1 | 0.23 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 1 | 0.23 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 1 | 0.23 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 1 | 0.23 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 17 | 0.23 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 17 | 0.23 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 13 | 0.23 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 13 | 0.23 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 13 | 0.23 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 19 | 0.23 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 19 | 0.23 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 19 | 0.23 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 4 | 0.23 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 4 | 0.23 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 16 | 0.23 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 16 | 0.23 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 5 | 0.23 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 5 | 0.23 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 5 | 0.23 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 5 | 0.23 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 5 | 0.23 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 5 | 0.23 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 16 | 0.23 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 16 | 0.23 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 16 | 0.23 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 16 | 0.23 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 16 | 0.23 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 16 | 0.23 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:92:CYS:HB3 | 10 | 0.23 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:92:CYS:HB3 | 10 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:92:CYS:HB3 | 10 | 0.23 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HB2 | 10 | 0.23 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HB2 | 10 | 0.23 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HB2 | 10 | 0.23 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 2 | 0.23 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 2 | 0.23 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 2 | 0.23 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 2 | 0.23 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 2 | 0.23 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 2 | 0.23 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:121:ARG:HB3 | 5 | 0.23 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:121:ARG:HB3 | 5 | 0.23 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:121:ARG:HB3 | 5 | 0.23 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:36:ILE:HB | 5 | 0.23 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:36:ILE:HB | 5 | 0.23 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:36:ILE:HB | 5 | 0.23 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:121:ARG:HB3 | 7 | 0.23 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:121:ARG:HB3 | 7 | 0.23 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:121:ARG:HB3 | 7 | 0.23 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:36:ILE:HB | 7 | 0.23 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:36:ILE:HB | 7 | 0.23 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:36:ILE:HB | 7 | 0.23 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:121:ARG:HB3 | 12 | 0.23 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:121:ARG:HB3 | 12 | 0.23 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:121:ARG:HB3 | 12 | 0.23 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:36:ILE:HB | 12 | 0.23 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:36:ILE:HB | 12 | 0.23 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:36:ILE:HB | 12 | 0.23 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 6 | 0.23 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 6 | 0.23 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 19 | 0.23 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 19 | 0.23 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 20 | 0.23 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 20 | 0.23 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 4 | 0.23 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 4 | 0.23 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 9 | 0.23 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 9 | 0.23 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 10 | 0.23 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 10 | 0.23 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 12 | 0.23 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 12 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 16 | 0.23 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 16 | 0.23 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 17 | 0.23 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 17 | 0.23 |
| (2,190) | 1:A:148:GLU:HA | 1:A:148:GLU:HG2 | 12 | 0.23 |
| (2,190) | 1:A:148:GLU:HA | 1:A:148:GLU:HG3 | 12 | 0.23 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG3 | 4 | 0.23 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG2 | 4 | 0.23 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG3 | 9 | 0.23 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG2 | 9 | 0.23 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 4 | 0.23 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 4 | 0.23 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 4 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD22 | 1 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD21 | 1 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD23 | 1 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD22 | 1 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD21 | 1 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD23 | 1 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD22 | 1 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD21 | 1 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD23 | 1 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD22 | 6 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD21 | 6 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD23 | 6 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD22 | 6 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD21 | 6 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD23 | 6 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD22 | 6 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD21 | 6 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD23 | 6 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.23 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.23 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 9 | 0.23 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 9 | 0.23 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 2 | 0.23 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 9 | 0.23 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 12 | 0.23 |
| (1,807) | 1:A:145:GLU:HG3 | 1:A:145:GLU:H | 5 | 0.23 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 10 | 0.23 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 10 | 0.23 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 10 | 0.23 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 11 | 0.23 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 11 | 0.23 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 11 | 0.23 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 14 | 0.23 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 14 | 0.23 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 14 | 0.23 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 16 | 0.23 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 16 | 0.23 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 16 | 0.23 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 14 | 0.23 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 16 | 0.23 |
| (1,713) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 3 | 0.23 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 1 | 0.23 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 13 | 0.23 |
| (1,454) | 1:A:57:GLU:HA | 1:A:57:GLU:HB2 | 5 | 0.23 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 2 | 0.23 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 2 | 0.23 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 2 | 0.23 |
| (1,370) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:98:ILE:H | 5 | 0.23 |
| (1,352) | 1:A:11:SER:HB2 | 1:A:12:ALA:H | 10 | 0.23 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 1 | 0.23 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 1 | 0.23 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 1 | 0.23 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 12 | 0.23 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 12 | 0.23 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 12 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 1 | 0.23 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 9 | 0.23 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 10 | 0.23 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 7 | 0.23 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 13 | 0.23 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 13 | 0.23 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 13 | 0.23 |
| (1,2203) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:60:GLY:HA3 | 20 | 0.23 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 17 | 0.23 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 1 | 0.23 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 1 | 0.23 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 1 | 0.23 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 2 | 0.23 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 2 | 0.23 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 2 | 0.23 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 11 | 0.23 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 11 | 0.23 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 11 | 0.23 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 20 | 0.23 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 20 | 0.23 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 20 | 0.23 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 7 | 0.23 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 8 | 0.23 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 9 | 0.23 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 12 | 0.23 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 13 | 0.23 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 18 | 0.23 |
| (1,216) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HG2 | 3 | 0.23 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 3 | 0.23 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 3 | 0.23 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 3 | 0.23 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 13 | 0.23 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 13 | 0.23 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 13 | 0.23 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 6 | 0.23 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 6 | 0.23 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 6 | 0.23 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 8 | 0.23 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 8 | 0.23 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 8 | 0.23 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 20 | 0.23 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 20 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 20 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 1 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 1 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 1 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 2 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 2 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 2 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 3 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 3 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 3 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 5 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 5 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 5 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 10 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 10 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 10 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 12 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 12 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 12 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 13 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 13 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 13 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 15 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 15 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 15 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 16 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 16 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 16 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 19 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 19 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 19 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 20 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 20 | 0.23 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 20 | 0.23 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 16 | 0.23 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD22 | 9 | 0.23 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD21 | 9 | 0.23 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD23 | 9 | 0.23 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 1 | 0.23 |
| (1,1852) | 1:A:135:LEU:H | 1:A:136:ASN:H | 4 | 0.23 |
| (1,1797) | 1:A:81:LYS:H | 1:A:79:ASN:HB3 | 7 | 0.23 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 5 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 9 | 0.23 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 20 | 0.23 |
| (1,1689) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:52:PHE:HB2 | 16 | 0.23 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 1 | 0.23 |
| (1,1642) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 18 | 0.23 |
| (1,1642) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 20 | 0.23 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 1 | 0.23 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 1 | 0.23 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 5 | 0.23 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 14 | 0.23 |
| (1,1556) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 9 | 0.23 |
| (1,1519) | 1:A:135:LEU:H | 1:A:135:LEU:HB2 | 4 | 0.23 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:123:PHE:H | 6 | 0.23 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:123:PHE:H | 6 | 0.23 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:123:PHE:H | 6 | 0.23 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 2 | 0.23 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 2 | 0.23 |
| (1,1317) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 2 | 0.23 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HD2 | 19 | 0.23 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HD2 | 19 | 0.23 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HD2 | 19 | 0.23 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 3 | 0.23 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 3 | 0.23 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 3 | 0.23 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 16 | 0.23 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 16 | 0.23 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 16 | 0.23 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 19 | 0.23 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 19 | 0.23 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 19 | 0.23 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 10 | 0.23 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 10 | 0.23 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 10 | 0.23 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:72:ASN:HD21 | 11 | 0.23 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:72:ASN:HD21 | 11 | 0.23 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:72:ASN:HD21 | 11 | 0.23 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 4 | 0.22 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 4 | 0.22 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 4 | 0.22 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 4 | 0.22 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 9 | 0.22 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 9 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 9 | 0.22 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 9 | 0.22 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 4 | 0.22 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 4 | 0.22 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 4 | 0.22 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 4 | 0.22 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 4 | 0.22 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 4 | 0.22 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 4 | 0.22 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 4 | 0.22 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 4 | 0.22 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 4 | 0.22 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 4 | 0.22 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 4 | 0.22 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 1 | 0.22 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 1 | 0.22 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 5 | 0.22 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 5 | 0.22 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 4 | 0.22 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 4 | 0.22 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 10 | 0.22 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 10 | 0.22 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 19 | 0.22 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 19 | 0.22 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 7 | 0.22 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 7 | 0.22 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 7 | 0.22 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB2 | 7 | 0.22 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB1 | 7 | 0.22 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB3 | 7 | 0.22 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 17 | 0.22 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 17 | 0.22 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 17 | 0.22 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB2 | 17 | 0.22 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB1 | 17 | 0.22 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB3 | 17 | 0.22 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 12 | 0.22 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 12 | 0.22 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 12 | 0.22 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 12 | 0.22 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 12 | 0.22 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 12 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 13 | 0.22 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 13 | 0.22 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 13 | 0.22 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 13 | 0.22 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 13 | 0.22 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 13 | 0.22 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:92:CYS:HB3 | 12 | 0.22 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:92:CYS:HB3 | 12 | 0.22 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:92:CYS:HB3 | 12 | 0.22 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HB2 | 12 | 0.22 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HB2 | 12 | 0.22 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HB2 | 12 | 0.22 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:121:ARG:HB3 | 10 | 0.22 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:121:ARG:HB3 | 10 | 0.22 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:121:ARG:HB3 | 10 | 0.22 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:36:ILE:HB | 10 | 0.22 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:36:ILE:HB | 10 | 0.22 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:36:ILE:HB | 10 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 14 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 14 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 14 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 14 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 14 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 14 | 0.22 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 6 | 0.22 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 6 | 0.22 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 6 | 0.22 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:119:LYS:H | 6 | 0.22 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:119:LYS:H | 6 | 0.22 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:119:LYS:H | 6 | 0.22 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 3 | 0.22 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 3 | 0.22 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 1 | 0.22 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 1 | 0.22 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 18 | 0.22 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 18 | 0.22 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 5 | 0.22 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 5 | 0.22 |
| (2,219) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:16:GLN:HG2 | 1 | 0.22 |
| (2,219) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:16:GLN:HG3 | 1 | 0.22 |
| (2,218) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:114:VAL:HG12 | 4 | 0.22 |
| (2,218) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:114:VAL:HG11 | 4 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,218) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:114:VAL:HG13 | 4 | 0.22 |
| (2,218) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:17:LEU:HD22 | 4 | 0.22 |
| (2,218) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:17:LEU:HD21 | 4 | 0.22 |
| (2,218) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:17:LEU:HD23 | 4 | 0.22 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG3 | 13 | 0.22 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG2 | 13 | 0.22 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 19 | 0.22 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 19 | 0.22 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 19 | 0.22 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 5 | 0.22 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 5 | 0.22 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 6 | 0.22 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 6 | 0.22 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 10 | 0.22 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 10 | 0.22 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 14 | 0.22 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 14 | 0.22 |
| (1,952) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HG12 | 10 | 0.22 |
| (1,836) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 2 | 0.22 |
| (1,836) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 9 | 0.22 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 9 | 0.22 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 15 | 0.22 |
| (1,713) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 15 | 0.22 |
| (1,713) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 16 | 0.22 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 10 | 0.22 |
| (1,678) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 8 | 0.22 |
| (1,6) | 1:A:123:PHE:HD2 | 1:A:119:LYS:HB2 | 2 | 0.22 |
| (1,574) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:48:ASN:HB2 | 15 | 0.22 |
| (1,554) | 1:A:147:HIS:HA | 1:A:147:HIS:HD2 | 5 | 0.22 |
| (1,520) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HG2 | 2 | 0.22 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 4 | 0.22 |
| (1,370) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:98:ILE:H | 14 | 0.22 |
| (1,336) | 1:A:52:PHE:H | 1:A:50:SER:HB3 | 18 | 0.22 |
| (1,319) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HB2 | 7 | 0.22 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 20 | 0.22 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 2 | 0.22 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 19 | 0.22 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 8 | 0.22 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 11 | 0.22 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 11 | 0.22 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 11 | 0.22 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 12 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 12 | 0.22 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 12 | 0.22 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 17 | 0.22 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 17 | 0.22 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 17 | 0.22 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 1 | 0.22 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 2 | 0.22 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 5 | 0.22 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 11 | 0.22 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 15 | 0.22 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 16 | 0.22 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 1 | 0.22 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 1 | 0.22 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 1 | 0.22 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 2 | 0.22 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 2 | 0.22 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 2 | 0.22 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 19 | 0.22 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 19 | 0.22 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 19 | 0.22 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 16 | 0.22 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 16 | 0.22 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 16 | 0.22 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 4 | 0.22 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 4 | 0.22 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 4 | 0.22 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 7 | 0.22 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 7 | 0.22 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 7 | 0.22 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 8 | 0.22 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 8 | 0.22 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 8 | 0.22 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 9 | 0.22 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 9 | 0.22 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 9 | 0.22 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 14 | 0.22 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 14 | 0.22 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 14 | 0.22 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 12 | 0.22 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD22 | 4 | 0.22 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD21 | 4 | 0.22 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD23 | 4 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 14 | 0.22 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 15 | 0.22 |
| (1,1922) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 10 | 0.22 |
| (1,1922) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 13 | 0.22 |
| (1,1908) | 1:A:70:VAL:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 12 | 0.22 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 14 | 0.22 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 1 | 0.22 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 1 | 0.22 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 1 | 0.22 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 2 | 0.22 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 2 | 0.22 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 2 | 0.22 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 5 | 0.22 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 5 | 0.22 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 5 | 0.22 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 20 | 0.22 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 20 | 0.22 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 20 | 0.22 |
| (1,1852) | 1:A:135:LEU:H | 1:A:136:ASN:H | 18 | 0.22 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 3 | 0.22 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 12 | 0.22 |
| (1,1740) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HB3 | 9 | 0.22 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 11 | 0.22 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 5 | 0.22 |
| (1,1689) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:52:PHE:HB2 | 15 | 0.22 |
| (1,1642) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 6 | 0.22 |
| (1,1642) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 12 | 0.22 |
| (1,1629) | 1:A:50:SER:H | 1:A:50:SER:HB2 | 19 | 0.22 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 3 | 0.22 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 5 | 0.22 |
| (1,1556) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 4 | 0.22 |
| (1,1418) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:146:TRP:H | 3 | 0.22 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HD2 | 9 | 0.22 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HD2 | 9 | 0.22 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HD2 | 9 | 0.22 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HA | 3 | 0.22 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HA | 3 | 0.22 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HA | 3 | 0.22 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HA | 13 | 0.22 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HA | 13 | 0.22 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HA | 13 | 0.22 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 1 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 1 | 0.22 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 1 | 0.22 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 3 | 0.22 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 3 | 0.22 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 3 | 0.22 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 6 | 0.22 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 6 | 0.22 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 6 | 0.22 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 8 | 0.22 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 8 | 0.22 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 8 | 0.22 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 9 | 0.22 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 20 | 0.22 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 8 | 0.21 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 8 | 0.21 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 8 | 0.21 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 17 | 0.21 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 17 | 0.21 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 17 | 0.21 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 12 | 0.21 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 12 | 0.21 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 12 | 0.21 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 12 | 0.21 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 12 | 0.21 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 12 | 0.21 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 12 | 0.21 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 12 | 0.21 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 12 | 0.21 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 12 | 0.21 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 12 | 0.21 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 12 | 0.21 |
| (2,548) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:20:LYS:HD3 | 17 | 0.21 |
| (2,548) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:56:ARG:HB3 | 17 | 0.21 |
| (2,548) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HB | 17 | 0.21 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 12 | 0.21 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 12 | 0.21 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 12 | 0.21 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 12 | 0.21 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG21 | 14 | 0.21 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG22 | 14 | 0.21 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG23 | 14 | 0.21 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG21 | 14 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG22 | 14 | 0.21 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG23 | 14 | 0.21 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 3 | 0.21 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 3 | 0.21 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 5 | 0.21 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 5 | 0.21 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 7 | 0.21 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 7 | 0.21 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 15 | 0.21 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 15 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 2 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 2 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 2 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 2 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 2 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 2 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 2 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 2 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 2 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 3 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 3 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 3 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 3 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 3 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 3 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 3 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 3 | 0.21 |
| (2,420) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 3 | 0.21 |
| (2,391) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:114:VAL:HG12 | 4 | 0.21 |
| (2,391) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:114:VAL:HG11 | 4 | 0.21 |
| (2,391) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:114:VAL:HG13 | 4 | 0.21 |
| (2,391) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 4 | 0.21 |
| (2,391) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 4 | 0.21 |
| (2,391) | 1:A:114:VAL:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 4 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 5 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 5 | 0.21 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 8 | 0.21 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 8 | 0.21 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 8 | 0.21 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 8 | 0.21 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 8 | 0.21 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 8 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 10 | 0.21 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 10 | 0.21 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 10 | 0.21 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 10 | 0.21 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 10 | 0.21 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 10 | 0.21 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 10 | 0.21 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 10 | 0.21 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 10 | 0.21 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:92:CYS:HB3 | 14 | 0.21 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:92:CYS:HB3 | 14 | 0.21 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:92:CYS:HB3 | 14 | 0.21 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HB2 | 14 | 0.21 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HB2 | 14 | 0.21 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HB2 | 14 | 0.21 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 6 | 0.21 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 6 | 0.21 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 6 | 0.21 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 6 | 0.21 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 6 | 0.21 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 6 | 0.21 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 8 | 0.21 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 8 | 0.21 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 8 | 0.21 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 8 | 0.21 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 8 | 0.21 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 8 | 0.21 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 19 | 0.21 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 19 | 0.21 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 19 | 0.21 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 19 | 0.21 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 19 | 0.21 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 19 | 0.21 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:121:ARG:HB3 | 18 | 0.21 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:121:ARG:HB3 | 18 | 0.21 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:121:ARG:HB3 | 18 | 0.21 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:36:ILE:HB | 18 | 0.21 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:36:ILE:HB | 18 | 0.21 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:36:ILE:HB | 18 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 3 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 3 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 3 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 3 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 3 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 3 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 15 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 15 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 15 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 15 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 15 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 15 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 16 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 16 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 16 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 16 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 16 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 16 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 18 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 18 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 18 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 18 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 18 | 0.21 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 18 | 0.21 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 1 | 0.21 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 1 | 0.21 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 1 | 0.21 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 1 | 0.21 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 1 | 0.21 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 1 | 0.21 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 13 | 0.21 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 13 | 0.21 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 14 | 0.21 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 14 | 0.21 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:4:LYS:HA | 7 | 0.21 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:4:LYS:HA | 7 | 0.21 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 9 | 0.21 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 9 | 0.21 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 12 | 0.21 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 12 | 0.21 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 17 | 0.21 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 17 | 0.21 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 4 | 0.21 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 4 | 0.21 |
| (2,213) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:128:GLY:HA3 | 13 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,213) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:128:GLY:HA2 | 13 | 0.21 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG3 | 2 | 0.21 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG2 | 2 | 0.21 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 6 | 0.21 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 6 | 0.21 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 12 | 0.21 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 12 | 0.21 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 12 | 0.21 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 16 | 0.21 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 16 | 0.21 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 16 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD22 | 15 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD21 | 15 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD23 | 15 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD22 | 15 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD21 | 15 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD23 | 15 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD22 | 15 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD21 | 15 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD23 | 15 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.21 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.21 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 2 | 0.21 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 2 | 0.21 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 12 | 0.21 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 12 | 0.21 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 16 | 0.21 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 16 | 0.21 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 18 | 0.21 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 18 | 0.21 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 19 | 0.21 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 19 | 0.21 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD22 | 8 | 0.21 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD21 | 8 | 0.21 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD23 | 8 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,949) | 1:A:87:ILE:HG12 | 1:A:73:MET:HA | 14 | 0.21 |
| (1,936) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:124:GLU:H | 2 | 0.21 |
| (1,935) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:124:GLU:HB2 | 20 | 0.21 |
| (1,933) | 1:A:121:ARG:HB2 | 1:A:121:ARG:HD2 | 19 | 0.21 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 1 | 0.21 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 12 | 0.21 |
| (1,836) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 4 | 0.21 |
| (1,812) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HB3 | 10 | 0.21 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 1 | 0.21 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 1 | 0.21 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 1 | 0.21 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 3 | 0.21 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 3 | 0.21 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 3 | 0.21 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 17 | 0.21 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 17 | 0.21 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 17 | 0.21 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 19 | 0.21 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 19 | 0.21 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 19 | 0.21 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 1 | 0.21 |
| (1,713) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 9 | 0.21 |
| (1,713) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HB3 | 18 | 0.21 |
| (1,586) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HA | 17 | 0.21 |
| (1,574) | 1:A:48:ASN:HA | 1:A:48:ASN:HB2 | 16 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:113:ASN:HA | 1:A:81:LYS:HG2 | 4 | 0.21 |
| (1,527) | 1:A:145:GLU:HA | 1:A:146:TRP:HB3 | 11 | 0.21 |
| (1,527) | 1:A:145:GLU:HA | 1:A:146:TRP:HB3 | 16 | 0.21 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 6 | 0.21 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 16 | 0.21 |
| (1,454) | 1:A:57:GLU:HA | 1:A:57:GLU:HB2 | 19 | 0.21 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 11 | 0.21 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 11 | 0.21 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 11 | 0.21 |
| (1,340) | 1:A:7:SER:H | 1:A:7:SER:HB2 | 17 | 0.21 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 3 | 0.21 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 7 | 0.21 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 7 | 0.21 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 7 | 0.21 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 13 | 0.21 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 13 | 0.21 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 13 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|--------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 5 | 0.21 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 5 | 0.21 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 5 | 0.21 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 11 | 0.21 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 11 | 0.21 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 11 | 0.21 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 6 | 0.21 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 12 | 0.21 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 4 | 0.21 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 9 | 0.21 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 9 | 0.21 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 9 | 0.21 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 1 | 0.21 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 4 | 0.21 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 10 | 0.21 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 4 | 0.21 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 4 | 0.21 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 4 | 0.21 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 6 | 0.21 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 6 | 0.21 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 6 | 0.21 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 8 | 0.21 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 8 | 0.21 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 8 | 0.21 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 14 | 0.21 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 14 | 0.21 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 14 | 0.21 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 16 | 0.21 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 16 | 0.21 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 16 | 0.21 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 10 | 0.21 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 14 | 0.21 |
| (1,2170) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HA | 17 | 0.21 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 9 | 0.21 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 9 | 0.21 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 9 | 0.21 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 1 | 0.21 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 1 | 0.21 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 1 | 0.21 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 12 | 0.21 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 12 | 0.21 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 12 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG21 | 17 | 0.21 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG22 | 17 | 0.21 |
| (1,2036) | 1:A:100:THR:H | 1:A:100:THR:HG23 | 17 | 0.21 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 1 | 0.21 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 2 | 0.21 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 4 | 0.21 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 14 | 0.21 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 17 | 0.21 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 18 | 0.21 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 4 | 0.21 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 13 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 3 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 3 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 3 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 9 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 9 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 9 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 11 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 11 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 11 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 12 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 12 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 12 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 13 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 13 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 13 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 14 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 14 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 14 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 18 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 18 | 0.21 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 18 | 0.21 |
| (1,1864) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HG2 | 13 | 0.21 |
| (1,1854) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HG | 14 | 0.21 |
| (1,1852) | 1:A:135:LEU:H | 1:A:136:ASN:H | 10 | 0.21 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 1 | 0.21 |
| (1,1705) | 1:A:138:ILE:H | 1:A:138:ILE:HG12 | 15 | 0.21 |
| (1,1689) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:52:PHE:HB2 | 4 | 0.21 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 3 | 0.21 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 6 | 0.21 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 9 | 0.21 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 20 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1643) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG3 | 16 | 0.21 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 2 | 0.21 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 7 | 0.21 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 20 | 0.21 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 1 | 0.21 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 6 | 0.21 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 8 | 0.21 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 9 | 0.21 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 10 | 0.21 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 20 | 0.21 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 2 | 0.21 |
| (1,1552) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:123:PHE:H | 16 | 0.21 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 7 | 0.21 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 7 | 0.21 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 7 | 0.21 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 11 | 0.21 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 11 | 0.21 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 11 | 0.21 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 16 | 0.21 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 16 | 0.21 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 16 | 0.21 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HA | 8 | 0.21 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HA | 8 | 0.21 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HA | 8 | 0.21 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 4 | 0.21 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 4 | 0.21 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 4 | 0.21 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 18 | 0.21 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 18 | 0.21 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 18 | 0.21 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 15 | 0.21 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 15 | 0.21 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 15 | 0.21 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 2 | 0.21 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD11 | 2 | 0.21 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD13 | 2 | 0.21 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD12 | 2 | 0.21 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 2 | 0.21 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD13 | 2 | 0.21 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD12 | 2 | 0.21 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD11 | 2 | 0.21 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD13 | 2 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 19 | 0.21 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 19 | 0.21 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 19 | 0.21 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 20 | 0.21 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 20 | 0.21 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 20 | 0.21 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:72:ASN:HD21 | 3 | 0.21 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:72:ASN:HD21 | 3 | 0.21 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:72:ASN:HD21 | 3 | 0.21 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:72:ASN:HD21 | 7 | 0.21 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:72:ASN:HD21 | 7 | 0.21 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:72:ASN:HD21 | 7 | 0.21 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:72:ASN:HD21 | 12 | 0.21 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:72:ASN:HD21 | 12 | 0.21 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:72:ASN:HD21 | 12 | 0.21 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:72:ASN:HD21 | 13 | 0.21 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:72:ASN:HD21 | 13 | 0.21 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:72:ASN:HD21 | 13 | 0.21 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:72:ASN:HD21 | 14 | 0.21 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:72:ASN:HD21 | 14 | 0.21 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:72:ASN:HD21 | 14 | 0.21 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 2 | 0.21 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 12 | 0.21 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 1 | 0.21 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 2 | 0.21 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 3 | 0.21 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 4 | 0.21 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 6 | 0.21 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 7 | 0.21 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 8 | 0.21 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 10 | 0.21 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 11 | 0.21 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 12 | 0.21 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 14 | 0.21 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 15 | 0.21 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 16 | 0.21 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 17 | 0.21 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 18 | 0.21 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 19 | 0.21 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 20 | 0.21 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 2 | 0.2 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 2 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 9 | 0.2 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 9 | 0.2 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 9 | 0.2 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 10 | 0.2 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 10 | 0.2 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 10 | 0.2 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 18 | 0.2 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 18 | 0.2 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 18 | 0.2 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 18 | 0.2 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 18 | 0.2 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 18 | 0.2 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 18 | 0.2 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 18 | 0.2 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 18 | 0.2 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 18 | 0.2 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 18 | 0.2 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 18 | 0.2 |
| (2,548) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:20:LYS:HD3 | 10 | 0.2 |
| (2,548) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:56:ARG:HB3 | 10 | 0.2 |
| (2,548) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HB | 10 | 0.2 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 2 | 0.2 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 2 | 0.2 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 2 | 0.2 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 2 | 0.2 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 7 | 0.2 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 7 | 0.2 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 7 | 0.2 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 7 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG21 | 3 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG22 | 3 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG23 | 3 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG21 | 3 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG22 | 3 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG23 | 3 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG21 | 7 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG22 | 7 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG23 | 7 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG21 | 7 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG22 | 7 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG23 | 7 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG21 | 10 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG22 | 10 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG23 | 10 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG21 | 10 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG22 | 10 | 0.2 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG23 | 10 | 0.2 |
| (2,516) | 1:A:16:GLN:HE22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 17 | 0.2 |
| (2,516) | 1:A:16:GLN:HE22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 17 | 0.2 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HB | 2 | 0.2 |
| (2,512) | 1:A:110:SER:H | 1:A:111:ILE:HG12 | 2 | 0.2 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 13 | 0.2 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 13 | 0.2 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:92:CYS:HB2 | 7 | 0.2 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:91:ASN:HB2 | 7 | 0.2 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 16 | 0.2 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 16 | 0.2 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 16 | 0.2 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 18 | 0.2 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 18 | 0.2 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 18 | 0.2 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 9 | 0.2 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 9 | 0.2 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 10 | 0.2 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 10 | 0.2 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 3 | 0.2 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 3 | 0.2 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 3 | 0.2 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 3 | 0.2 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 3 | 0.2 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 3 | 0.2 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 11 | 0.2 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 11 | 0.2 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 11 | 0.2 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 11 | 0.2 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 11 | 0.2 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 11 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 1 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 1 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 1 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 1 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 1 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 1 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 1 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 1 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 1 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 4 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 4 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 4 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 4 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 4 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 4 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 4 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 4 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 4 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 7 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 7 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 7 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 7 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 7 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 7 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 7 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 7 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 7 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 11 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 11 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 11 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 11 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 11 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 11 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 11 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 11 | 0.2 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 11 | 0.2 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:92:CYS:HB3 | 11 | 0.2 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:92:CYS:HB3 | 11 | 0.2 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:92:CYS:HB3 | 11 | 0.2 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HB2 | 11 | 0.2 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HB2 | 11 | 0.2 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HB2 | 11 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 1 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 1 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 1 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 1 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 1 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 1 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 4 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 4 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 4 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 4 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 4 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 4 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 7 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 7 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 7 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 7 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 7 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 7 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 12 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 12 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 12 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 12 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 12 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 12 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 14 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 14 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 14 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 14 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 14 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 14 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 16 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 16 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 16 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 16 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 16 | 0.2 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 16 | 0.2 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 4 | 0.2 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 4 | 0.2 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 4 | 0.2 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 4 | 0.2 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 4 | 0.2 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 4 | 0.2 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 8 | 0.2 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 8 | 0.2 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 8 | 0.2 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 8 | 0.2 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 8 | 0.2 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 8 | 0.2 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 17 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 17 | 0.2 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 17 | 0.2 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 17 | 0.2 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 17 | 0.2 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 17 | 0.2 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 13 | 0.2 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 13 | 0.2 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 13 | 0.2 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:119:LYS:H | 13 | 0.2 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:119:LYS:H | 13 | 0.2 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:119:LYS:H | 13 | 0.2 |
| (2,300) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 5 | 0.2 |
| (2,300) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:111:ILE:HG13 | 5 | 0.2 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 20 | 0.2 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 20 | 0.2 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 8 | 0.2 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 8 | 0.2 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 14 | 0.2 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 14 | 0.2 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 14 | 0.2 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 14 | 0.2 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 14 | 0.2 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 14 | 0.2 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 11 | 0.2 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 11 | 0.2 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 11 | 0.2 |
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 15 | 0.2 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 15 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD22 | 12 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD21 | 12 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD23 | 12 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD22 | 12 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD21 | 12 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD23 | 12 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD22 | 12 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD21 | 12 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD23 | 12 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.2 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.2 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE2 | 1:A:138:ILE:HB | 6 | 0.2 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE1 | 1:A:138:ILE:HB | 6 | 0.2 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE2 | 1:A:138:ILE:HB | 14 | 0.2 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE1 | 1:A:138:ILE:HB | 14 | 0.2 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE2 | 1:A:138:ILE:HB | 19 | 0.2 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE1 | 1:A:138:ILE:HB | 19 | 0.2 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 8 | 0.2 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 8 | 0.2 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 11 | 0.2 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 11 | 0.2 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 20 | 0.2 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 20 | 0.2 |
| (1,933) | 1:A:121:ARG:HB2 | 1:A:121:ARG:HD2 | 11 | 0.2 |
| (1,870) | 1:A:74:ARG:HB3 | 1:A:74:ARG:HD2 | 16 | 0.2 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 4 | 0.2 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 6 | 0.2 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 7 | 0.2 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 16 | 0.2 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 17 | 0.2 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 20 | 0.2 |
| (1,836) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 16 | 0.2 |
| (1,836) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 19 | 0.2 |
| (1,836) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 20 | 0.2 |
| (1,808) | 1:A:145:GLU:HG3 | 1:A:145:GLU:HA | 4 | 0.2 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 7 | 0.2 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 7 | 0.2 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 7 | 0.2 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 13 | 0.2 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 13 | 0.2 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 13 | 0.2 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 6 | 0.2 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 7 | 0.2 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 11 | 0.2 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 13 | 0.2 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 17 | 0.2 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 18 | 0.2 |
| (1,591) | 1:A:141:ALA:HA | 1:A:142:GLN:HB2 | 20 | 0.2 |
| (1,587) | 1:A:24:ASN:HA | 1:A:24:ASN:HB2 | 1 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,587) | 1:A:24:ASN:HA | 1:A:24:ASN:HB2 | 4 | 0.2 |
| (1,587) | 1:A:24:ASN:HA | 1:A:24:ASN:HB2 | 20 | 0.2 |
| (1,552) | 1:A:137:ASP:HA | 1:A:138:ILE:HA | 9 | 0.2 |
| (1,552) | 1:A:137:ASP:HA | 1:A:138:ILE:HA | 20 | 0.2 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 7 | 0.2 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 17 | 0.2 |
| (1,454) | 1:A:57:GLU:HA | 1:A:57:GLU:HB2 | 9 | 0.2 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 8 | 0.2 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 8 | 0.2 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 8 | 0.2 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 12 | 0.2 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 12 | 0.2 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 12 | 0.2 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 4 | 0.2 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 10 | 0.2 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 11 | 0.2 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 12 | 0.2 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 2 | 0.2 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 2 | 0.2 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 2 | 0.2 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 4 | 0.2 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 4 | 0.2 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 4 | 0.2 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 5 | 0.2 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 5 | 0.2 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 5 | 0.2 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 8 | 0.2 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 8 | 0.2 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 8 | 0.2 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 9 | 0.2 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 9 | 0.2 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 9 | 0.2 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 4 | 0.2 |
| (1,232) | 1:A:123:PHE:HD1 | 1:A:47:LYS:HG2 | 1 | 0.2 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 8 | 0.2 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 8 | 0.2 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 8 | 0.2 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 4 | 0.2 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 17 | 0.2 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 18 | 0.2 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 20 | 0.2 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 10 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 1 | 0.2 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 1 | 0.2 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 1 | 0.2 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 3 | 0.2 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 13 | 0.2 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 8 | 0.2 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 8 | 0.2 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 8 | 0.2 |
| (1,2179) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HG2 | 14 | 0.2 |
| (1,2179) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HG2 | 16 | 0.2 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 7 | 0.2 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 7 | 0.2 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 7 | 0.2 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 10 | 0.2 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 10 | 0.2 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 10 | 0.2 |
| (1,216) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HG2 | 4 | 0.2 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 15 | 0.2 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 15 | 0.2 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 15 | 0.2 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 18 | 0.2 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 18 | 0.2 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 18 | 0.2 |
| (1,2078) | 1:A:84:ASN:HD22 | 1:A:85:PHE:H | 2 | 0.2 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 3 | 0.2 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 3 | 0.2 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 3 | 0.2 |
| (1,2059) | 1:A:136:ASN:HD21 | 1:A:137:ASP:H | 10 | 0.2 |
| (1,2059) | 1:A:136:ASN:HD21 | 1:A:137:ASP:H | 18 | 0.2 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 6 | 0.2 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 7 | 0.2 |
| (1,2005) | 1:A:127:SER:H | 1:A:126:ALA:HA | 18 | 0.2 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 1 | 0.2 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 2 | 0.2 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 17 | 0.2 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 4 | 0.2 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 4 | 0.2 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 4 | 0.2 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 6 | 0.2 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 6 | 0.2 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 6 | 0.2 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 7 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 7 | 0.2 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 7 | 0.2 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 15 | 0.2 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 15 | 0.2 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 15 | 0.2 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 16 | 0.2 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 16 | 0.2 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 16 | 0.2 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 17 | 0.2 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 17 | 0.2 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 17 | 0.2 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 7 | 0.2 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 7 | 0.2 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 7 | 0.2 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 11 | 0.2 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 3 | 0.2 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 20 | 0.2 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 11 | 0.2 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 19 | 0.2 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 19 | 0.2 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 19 | 0.2 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 19 | 0.2 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 5 | 0.2 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 4 | 0.2 |
| (1,1643) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG3 | 9 | 0.2 |
| (1,1643) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG3 | 20 | 0.2 |
| (1,1642) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 16 | 0.2 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 19 | 0.2 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 16 | 0.2 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 4 | 0.2 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 6 | 0.2 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 16 | 0.2 |
| (1,1556) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 1 | 0.2 |
| (1,1532) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 4 | 0.2 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 15 | 0.2 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 15 | 0.2 |
| (1,1379) | 1:A:122:LEU:HD23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 15 | 0.2 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:123:PHE:HD2 | 3 | 0.2 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:123:PHE:HD2 | 3 | 0.2 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:123:PHE:HD2 | 3 | 0.2 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 2 | 0.2 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 2 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 2 | 0.2 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 9 | 0.2 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 9 | 0.2 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 9 | 0.2 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 12 | 0.2 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 12 | 0.2 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 12 | 0.2 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 15 | 0.2 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 15 | 0.2 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 15 | 0.2 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HA | 1 | 0.2 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HA | 1 | 0.2 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HA | 1 | 0.2 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HA | 12 | 0.2 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HA | 12 | 0.2 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HA | 12 | 0.2 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 5 | 0.2 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 5 | 0.2 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 5 | 0.2 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 18 | 0.2 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 18 | 0.2 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 18 | 0.2 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 6 | 0.2 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 6 | 0.2 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 6 | 0.2 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 10 | 0.2 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 10 | 0.2 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 10 | 0.2 |
| (1,1091) | 1:A:4:LYS:HG3 | 1:A:5:TYR:H | 14 | 0.2 |
| (1,1074) | 1:A:76:LYS:HG3 | 1:A:77:ILE:H | 10 | 0.2 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD12 | 1:A:32:LEU:HA | 11 | 0.2 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD11 | 1:A:32:LEU:HA | 11 | 0.2 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD13 | 1:A:32:LEU:HA | 11 | 0.2 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 5 | 0.2 |
| (1,1019) | 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:105:PHE:H | 11 | 0.2 |
| (2,85) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HG2 | 2 | 0.19 |
| (2,85) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:56:ARG:HG2 | 2 | 0.19 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 5 | 0.19 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 5 | 0.19 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 5 | 0.19 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 13 | 0.19 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 13 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 13 | 0.19 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 20 | 0.19 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 20 | 0.19 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 20 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 7 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 7 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 7 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 7 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 7 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 7 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 7 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 7 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 7 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 7 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 7 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 7 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 17 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 17 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 17 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 17 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 17 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 17 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 17 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 17 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 17 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 17 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 17 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 17 | 0.19 |
| (2,548) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:20:LYS:HD3 | 5 | 0.19 |
| (2,548) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:56:ARG:HB3 | 5 | 0.19 |
| (2,548) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HB | 5 | 0.19 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 14 | 0.19 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 14 | 0.19 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 14 | 0.19 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 14 | 0.19 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG21 | 4 | 0.19 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG22 | 4 | 0.19 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG23 | 4 | 0.19 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG21 | 4 | 0.19 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG22 | 4 | 0.19 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG23 | 4 | 0.19 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG21 | 6 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG22 | 6 | 0.19 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG23 | 6 | 0.19 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG21 | 6 | 0.19 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG22 | 6 | 0.19 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG23 | 6 | 0.19 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 4 | 0.19 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 4 | 0.19 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 4 | 0.19 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 4 | 0.19 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 4 | 0.19 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 4 | 0.19 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:32:LEU:HD12 | 4 | 0.19 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:32:LEU:HD11 | 4 | 0.19 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:32:LEU:HD13 | 4 | 0.19 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 16 | 0.19 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 16 | 0.19 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 10 | 0.19 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 10 | 0.19 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 10 | 0.19 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD12 | 10 | 0.19 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD11 | 10 | 0.19 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD13 | 10 | 0.19 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 6 | 0.19 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 6 | 0.19 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 6 | 0.19 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD1 | 1:A:99:GLU:HG3 | 6 | 0.19 |
| (2,36) | 1:A:102:TYR:HD2 | 1:A:73:MET:HG3 | 6 | 0.19 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB3 | 3 | 0.19 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB3 | 3 | 0.19 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB3 | 3 | 0.19 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB2 | 3 | 0.19 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB2 | 3 | 0.19 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB2 | 3 | 0.19 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 1 | 0.19 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 1 | 0.19 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 1 | 0.19 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 1 | 0.19 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 1 | 0.19 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 1 | 0.19 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 2 | 0.19 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 2 | 0.19 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 2 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 2 | 0.19 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 2 | 0.19 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 2 | 0.19 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 8 | 0.19 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 8 | 0.19 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 8 | 0.19 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 8 | 0.19 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 8 | 0.19 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 8 | 0.19 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 8 | 0.19 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 8 | 0.19 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 8 | 0.19 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 17 | 0.19 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 17 | 0.19 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 17 | 0.19 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 17 | 0.19 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 17 | 0.19 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 17 | 0.19 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 17 | 0.19 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 17 | 0.19 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 17 | 0.19 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 5 | 0.19 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 5 | 0.19 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 5 | 0.19 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 5 | 0.19 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 5 | 0.19 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 5 | 0.19 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 7 | 0.19 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 7 | 0.19 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 7 | 0.19 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 7 | 0.19 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 7 | 0.19 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 7 | 0.19 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 5 | 0.19 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 5 | 0.19 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 5 | 0.19 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 5 | 0.19 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 5 | 0.19 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 5 | 0.19 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 17 | 0.19 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 17 | 0.19 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 17 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 17 | 0.19 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 17 | 0.19 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 17 | 0.19 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 19 | 0.19 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 19 | 0.19 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 19 | 0.19 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 19 | 0.19 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 19 | 0.19 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 19 | 0.19 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 20 | 0.19 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 20 | 0.19 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 20 | 0.19 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:119:LYS:H | 20 | 0.19 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:119:LYS:H | 20 | 0.19 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:119:LYS:H | 20 | 0.19 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 17 | 0.19 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 17 | 0.19 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 17 | 0.19 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 17 | 0.19 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 17 | 0.19 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 17 | 0.19 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:4:LYS:HA | 2 | 0.19 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:4:LYS:HA | 2 | 0.19 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 13 | 0.19 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 13 | 0.19 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 14 | 0.19 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 14 | 0.19 |
| (2,238) | 1:A:85:PHE:HB3 | 1:A:76:LYS:H | 12 | 0.19 |
| (2,238) | 1:A:85:PHE:HB3 | 1:A:86:ASN:H | 12 | 0.19 |
| (2,238) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:76:LYS:H | 12 | 0.19 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 6 | 0.19 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 6 | 0.19 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 13 | 0.19 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 13 | 0.19 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 15 | 0.19 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 15 | 0.19 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 16 | 0.19 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 16 | 0.19 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 16 | 0.19 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 16 | 0.19 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 16 | 0.19 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 16 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 19 | 0.19 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 19 | 0.19 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 19 | 0.19 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 19 | 0.19 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 19 | 0.19 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 19 | 0.19 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 17 | 0.19 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 17 | 0.19 |
| (2,175) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:98:ILE:HD12 | 4 | 0.19 |
| (2,175) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:98:ILE:HD11 | 4 | 0.19 |
| (2,175) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:98:ILE:HD13 | 4 | 0.19 |
| (2,175) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG12 | 4 | 0.19 |
| (2,164) | 1:A:131:SER:HB3 | 1:A:131:SER:H | 19 | 0.19 |
| (2,164) | 1:A:127:SER:H | 1:A:127:SER:HB3 | 19 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD22 | 5 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD21 | 5 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD23 | 5 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD22 | 5 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD21 | 5 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD23 | 5 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD22 | 5 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD21 | 5 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD23 | 5 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.19 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE2 | 1:A:138:ILE:HB | 17 | 0.19 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE1 | 1:A:138:ILE:HB | 17 | 0.19 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE2 | 1:A:138:ILE:HB | 20 | 0.19 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE1 | 1:A:138:ILE:HB | 20 | 0.19 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 1 | 0.19 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 1 | 0.19 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 3 | 0.19 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 3 | 0.19 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 4 | 0.19 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 4 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 7 | 0.19 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 7 | 0.19 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 13 | 0.19 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 13 | 0.19 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 17 | 0.19 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 17 | 0.19 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HE1 | 3 | 0.19 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HE1 | 3 | 0.19 |
| (1,949) | 1:A:87:ILE:HG12 | 1:A:73:MET:HA | 7 | 0.19 |
| (1,949) | 1:A:87:ILE:HG12 | 1:A:73:MET:HA | 8 | 0.19 |
| (1,933) | 1:A:121:ARG:HB2 | 1:A:121:ARG:HD2 | 7 | 0.19 |
| (1,915) | 1:A:146:TRP:HB3 | 1:A:146:TRP:H | 15 | 0.19 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 8 | 0.19 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 11 | 0.19 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 17 | 0.19 |
| (1,836) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 13 | 0.19 |
| (1,808) | 1:A:145:GLU:HG3 | 1:A:145:GLU:HA | 18 | 0.19 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 3 | 0.19 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 18 | 0.19 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 19 | 0.19 |
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 5 | 0.19 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 3 | 0.19 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 12 | 0.19 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 13 | 0.19 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 14 | 0.19 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 16 | 0.19 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 20 | 0.19 |
| (1,678) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 18 | 0.19 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD12 | 10 | 0.19 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD11 | 10 | 0.19 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD13 | 10 | 0.19 |
| (1,570) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:137:ASP:H | 14 | 0.19 |
| (1,554) | 1:A:147:HIS:HA | 1:A:147:HIS:HD2 | 6 | 0.19 |
| (1,527) | 1:A:145:GLU:HA | 1:A:146:TRP:HB3 | 19 | 0.19 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 2 | 0.19 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 11 | 0.19 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 12 | 0.19 |
| (1,461) | 1:A:128:GLY:H | 1:A:127:SER:HA | 10 | 0.19 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 3 | 0.19 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 3 | 0.19 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 3 | 0.19 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 4 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 4 | 0.19 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 4 | 0.19 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 17 | 0.19 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 17 | 0.19 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 17 | 0.19 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 6 | 0.19 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 13 | 0.19 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 18 | 0.19 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 1 | 0.19 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 1 | 0.19 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 1 | 0.19 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 12 | 0.19 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 12 | 0.19 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 12 | 0.19 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 12 | 0.19 |
| (1,232) | 1:A:123:PHE:HD1 | 1:A:47:LYS:HG2 | 19 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 20 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 20 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 20 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 20 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 20 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 20 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 20 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 20 | 0.19 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 20 | 0.19 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 11 | 0.19 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 13 | 0.19 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 14 | 0.19 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 12 | 0.19 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 12 | 0.19 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 12 | 0.19 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 14 | 0.19 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 14 | 0.19 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 14 | 0.19 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 18 | 0.19 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 18 | 0.19 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 18 | 0.19 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 2 | 0.19 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 11 | 0.19 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 10 | 0.19 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 10 | 0.19 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 10 | 0.19 |
| (1,216) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HG2 | 5 | 0.19 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG12 | 1 | 0.19 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG11 | 1 | 0.19 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG13 | 1 | 0.19 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG12 | 6 | 0.19 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG11 | 6 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG13 | 6 | 0.19 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 7 | 0.19 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 7 | 0.19 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 7 | 0.19 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 13 | 0.19 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 13 | 0.19 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 13 | 0.19 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 18 | 0.19 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 18 | 0.19 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 18 | 0.19 |
| (1,2059) | 1:A:136:ASN:HD21 | 1:A:137:ASP:H | 7 | 0.19 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 3 | 0.19 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 13 | 0.19 |
| (1,2012) | 1:A:24:ASN:HD22 | 1:A:24:ASN:HB3 | 7 | 0.19 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 11 | 0.19 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 13 | 0.19 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 12 | 0.19 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 8 | 0.19 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 8 | 0.19 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 8 | 0.19 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 10 | 0.19 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 10 | 0.19 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 10 | 0.19 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG21 | 19 | 0.19 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG22 | 19 | 0.19 |
| (1,1882) | 1:A:68:THR:H | 1:A:68:THR:HG23 | 19 | 0.19 |
| (1,1854) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HG | 4 | 0.19 |
| (1,1809) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:35:GLU:HG3 | 7 | 0.19 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 8 | 0.19 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 10 | 0.19 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 14 | 0.19 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 11 | 0.19 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 11 | 0.19 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 11 | 0.19 |
| (1,1689) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:52:PHE:HB2 | 14 | 0.19 |
| (1,1689) | 1:A:53:ASP:H | 1:A:52:PHE:HB2 | 19 | 0.19 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 2 | 0.19 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 10 | 0.19 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 18 | 0.19 |
| (1,1643) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG3 | 14 | 0.19 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 2 | 0.19 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 13 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 18 | 0.19 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 7 | 0.19 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 17 | 0.19 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 18 | 0.19 |
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 18 | 0.19 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 1 | 0.19 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 1 | 0.19 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 1 | 0.19 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 3 | 0.19 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 3 | 0.19 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 3 | 0.19 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 4 | 0.19 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 4 | 0.19 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 4 | 0.19 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 10 | 0.19 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 10 | 0.19 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 10 | 0.19 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 12 | 0.19 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 12 | 0.19 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 12 | 0.19 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 20 | 0.19 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 20 | 0.19 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 20 | 0.19 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HA | 6 | 0.19 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HA | 6 | 0.19 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HA | 6 | 0.19 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HA | 8 | 0.19 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HA | 8 | 0.19 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HA | 8 | 0.19 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:123:PHE:HD2 | 15 | 0.19 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:123:PHE:HD2 | 15 | 0.19 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:123:PHE:HD2 | 15 | 0.19 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 3 | 0.19 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 3 | 0.19 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 3 | 0.19 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 6 | 0.19 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 6 | 0.19 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 6 | 0.19 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 13 | 0.19 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 13 | 0.19 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 13 | 0.19 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 17 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 17 | 0.19 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 17 | 0.19 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 7 | 0.19 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 7 | 0.19 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 7 | 0.19 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 7 | 0.19 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 7 | 0.19 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 7 | 0.19 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 3 | 0.19 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 3 | 0.19 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 3 | 0.19 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 10 | 0.19 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 10 | 0.19 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 10 | 0.19 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 12 | 0.19 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 12 | 0.19 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 12 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 7 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD11 | 7 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD13 | 7 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD12 | 7 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 7 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD13 | 7 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD12 | 7 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD11 | 7 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD13 | 7 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 12 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD11 | 12 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD13 | 12 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD12 | 12 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 12 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD13 | 12 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD12 | 12 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD11 | 12 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD13 | 12 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 18 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD11 | 18 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD13 | 18 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD12 | 18 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 18 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD13 | 18 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD12 | 18 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD11 | 18 | 0.19 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD13 | 18 | 0.19 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 1 | 0.19 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 1 | 0.19 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 1 | 0.19 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 12 | 0.19 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 12 | 0.19 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 12 | 0.19 |
| (1,116) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HB3 | 10 | 0.19 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 9 | 0.19 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 9 | 0.19 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 9 | 0.19 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 7 | 0.19 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 7 | 0.19 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 7 | 0.19 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 11 | 0.19 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 11 | 0.19 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 11 | 0.19 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:72:ASN:HD21 | 20 | 0.19 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:72:ASN:HD21 | 20 | 0.19 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:72:ASN:HD21 | 20 | 0.19 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 3 | 0.19 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 15 | 0.19 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 16 | 0.19 |
| (1,1019) | 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:105:PHE:H | 10 | 0.19 |
| (1,1019) | 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:105:PHE:H | 17 | 0.19 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 5 | 0.19 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 9 | 0.19 |
| (1,1010) | 1:A:96:PRO:HG2 | 1:A:96:PRO:HA | 13 | 0.19 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 16 | 0.18 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 16 | 0.18 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:61:TYR:HB2 | 17 | 0.18 |
| (2,79) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:61:TYR:HB2 | 17 | 0.18 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 3 | 0.18 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 3 | 0.18 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 3 | 0.18 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 6 | 0.18 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 6 | 0.18 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 6 | 0.18 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 14 | 0.18 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 14 | 0.18 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 14 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 3 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 3 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 3 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 3 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 3 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 3 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 3 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 3 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 3 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 3 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 3 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 3 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 4 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 4 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 4 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 4 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 4 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 4 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 4 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 4 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 4 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 4 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 4 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 4 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 16 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 16 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 16 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 16 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 16 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 16 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 16 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 16 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 16 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 16 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 16 | 0.18 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 16 | 0.18 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 19 | 0.18 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 19 | 0.18 |
| (2,548) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:20:LYS:HD3 | 4 | 0.18 |
| (2,548) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:56:ARG:HB3 | 4 | 0.18 |
| (2,548) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HB | 4 | 0.18 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 16 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 16 | 0.18 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 16 | 0.18 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 16 | 0.18 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 19 | 0.18 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 19 | 0.18 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 19 | 0.18 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 19 | 0.18 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG21 | 12 | 0.18 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG22 | 12 | 0.18 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG23 | 12 | 0.18 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG21 | 12 | 0.18 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG22 | 12 | 0.18 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG23 | 12 | 0.18 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 1 | 0.18 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 1 | 0.18 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 1 | 0.18 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 1 | 0.18 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 1 | 0.18 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 1 | 0.18 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 1 | 0.18 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 1 | 0.18 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 9 | 0.18 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 9 | 0.18 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 14 | 0.18 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 14 | 0.18 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 20 | 0.18 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 20 | 0.18 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG3 | 8 | 0.18 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 8 | 0.18 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HG3 | 17 | 0.18 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 17 | 0.18 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 17 | 0.18 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HG3 | 19 | 0.18 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 19 | 0.18 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 19 | 0.18 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 9 | 0.18 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 9 | 0.18 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 9 | 0.18 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB2 | 9 | 0.18 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB1 | 9 | 0.18 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB3 | 9 | 0.18 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 4 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 4 | 0.18 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 4 | 0.18 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 4 | 0.18 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 4 | 0.18 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 4 | 0.18 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 0.18 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 0.18 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 20 | 0.18 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 20 | 0.18 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 20 | 0.18 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 20 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 6 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 6 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 6 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 6 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 6 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 6 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 6 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 6 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 6 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 18 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 18 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 18 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 18 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 18 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 18 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 18 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 18 | 0.18 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 18 | 0.18 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:92:CYS:HB3 | 13 | 0.18 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:92:CYS:HB3 | 13 | 0.18 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:92:CYS:HB3 | 13 | 0.18 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HB2 | 13 | 0.18 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HB2 | 13 | 0.18 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HB2 | 13 | 0.18 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 3 | 0.18 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 3 | 0.18 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 3 | 0.18 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 3 | 0.18 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 3 | 0.18 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 3 | 0.18 |
| (2,340) | 1:A:138:ILE:HG22 | 1:A:137:ASP:H | 9 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,340) | 1:A:138:ILE:HG21 | 1:A:137:ASP:H | 9 | 0.18 |
| (2,340) | 1:A:138:ILE:HG23 | 1:A:137:ASP:H | 9 | 0.18 |
| (2,340) | 1:A:138:ILE:HG22 | 1:A:140:GLU:H | 9 | 0.18 |
| (2,340) | 1:A:138:ILE:HG21 | 1:A:140:GLU:H | 9 | 0.18 |
| (2,340) | 1:A:138:ILE:HG23 | 1:A:140:GLU:H | 9 | 0.18 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 15 | 0.18 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 15 | 0.18 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 15 | 0.18 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 15 | 0.18 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 15 | 0.18 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 15 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 1 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 1 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 1 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 1 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 1 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 1 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 2 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 2 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 2 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 2 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 2 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 2 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 11 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 11 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 11 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 11 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 11 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 11 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 12 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 12 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 12 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 12 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 12 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 12 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 13 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 13 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 13 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 13 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 13 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 13 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 14 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 14 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 14 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 14 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 14 | 0.18 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 14 | 0.18 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 11 | 0.18 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 11 | 0.18 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 11 | 0.18 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 11 | 0.18 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 11 | 0.18 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 11 | 0.18 |
| (2,30) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:4:LYS:HG2 | 4 | 0.18 |
| (2,30) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:28:THR:HG21 | 4 | 0.18 |
| (2,30) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:28:THR:HG22 | 4 | 0.18 |
| (2,30) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:28:THR:HG23 | 4 | 0.18 |
| (2,30) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:4:LYS:HG2 | 4 | 0.18 |
| (2,294) | 1:A:25:GLU:HB3 | 1:A:18:THR:HG21 | 19 | 0.18 |
| (2,294) | 1:A:25:GLU:HB3 | 1:A:18:THR:HG22 | 19 | 0.18 |
| (2,294) | 1:A:25:GLU:HB3 | 1:A:18:THR:HG23 | 19 | 0.18 |
| (2,294) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:45:LYS:HG3 | 19 | 0.18 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 11 | 0.18 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 11 | 0.18 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE1 | 1:A:43:LYS:HG2 | 6 | 0.18 |
| (2,23) | 1:A:123:PHE:HE2 | 1:A:43:LYS:HG2 | 6 | 0.18 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 4 | 0.18 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 4 | 0.18 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 4 | 0.18 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 4 | 0.18 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 4 | 0.18 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 4 | 0.18 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 7 | 0.18 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 7 | 0.18 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 7 | 0.18 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 7 | 0.18 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 7 | 0.18 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 7 | 0.18 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 20 | 0.18 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 20 | 0.18 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 20 | 0.18 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 20 | 0.18 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 20 | 0.18 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 20 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 5 | 0.18 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 5 | 0.18 |
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 10 | 0.18 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 10 | 0.18 |
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 20 | 0.18 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 20 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD22 | 10 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD21 | 10 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD23 | 10 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD22 | 10 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD21 | 10 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD23 | 10 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD22 | 10 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD21 | 10 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD23 | 10 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD22 | 11 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD21 | 11 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD23 | 11 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD22 | 11 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD21 | 11 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD23 | 11 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD22 | 11 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD21 | 11 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD23 | 11 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE2 | 1:A:138:ILE:HB | 5 | 0.18 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE1 | 1:A:138:ILE:HB | 5 | 0.18 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE2 | 1:A:138:ILE:HB | 7 | 0.18 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE1 | 1:A:138:ILE:HB | 7 | 0.18 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE2 | 1:A:138:ILE:HB | 10 | 0.18 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE1 | 1:A:138:ILE:HB | 10 | 0.18 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE2 | 1:A:138:ILE:HB | 18 | 0.18 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE1 | 1:A:138:ILE:HB | 18 | 0.18 |
| (2,124) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HB | 19 | 0.18 |
| (2,124) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HB | 19 | 0.18 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE2 | 15 | 0.18 |
| (2,112) | 1:A:85:PHE:HA | 1:A:75:PHE:HE1 | 15 | 0.18 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HE1 | 10 | 0.18 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HE1 | 10 | 0.18 |
| (1,982) | 1:A:56:ARG:HB2 | 1:A:52:PHE:HA | 16 | 0.18 |
| (1,952) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HG12 | 11 | 0.18 |
| (1,952) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HG12 | 19 | 0.18 |
| (1,936) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:124:GLU:H | 18 | 0.18 |
| (1,933) | 1:A:121:ARG:HB2 | 1:A:121:ARG:HD2 | 10 | 0.18 |
| (1,926) | 1:A:140:GLU:H | 1:A:140:GLU:HB2 | 12 | 0.18 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 3 | 0.18 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 9 | 0.18 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 20 | 0.18 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 6 | 0.18 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 7 | 0.18 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 14 | 0.18 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 18 | 0.18 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 8 | 0.18 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 8 | 0.18 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 8 | 0.18 |
| (1,740) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:19:ASN:HB3 | 14 | 0.18 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 10 | 0.18 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 2 | 0.18 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 6 | 0.18 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 7 | 0.18 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 11 | 0.18 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 15 | 0.18 |
| (1,554) | 1:A:147:HIS:HA | 1:A:147:HIS:HD2 | 2 | 0.18 |
| (1,552) | 1:A:137:ASP:HA | 1:A:138:ILE:HA | 1 | 0.18 |
| (1,552) | 1:A:137:ASP:HA | 1:A:138:ILE:HA | 3 | 0.18 |
| (1,552) | 1:A:137:ASP:HA | 1:A:138:ILE:HA | 18 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,527) | 1:A:145:GLU:HA | 1:A:146:TRP:HB3 | 3 | 0.18 |
| (1,527) | 1:A:145:GLU:HA | 1:A:146:TRP:HB3 | 5 | 0.18 |
| (1,520) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HG2 | 9 | 0.18 |
| (1,475) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:35:GLU:HA | 6 | 0.18 |
| (1,475) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:35:GLU:HA | 12 | 0.18 |
| (1,475) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:35:GLU:HA | 15 | 0.18 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 5 | 0.18 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 8 | 0.18 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 14 | 0.18 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 20 | 0.18 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 5 | 0.18 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 5 | 0.18 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 5 | 0.18 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 7 | 0.18 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 7 | 0.18 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 7 | 0.18 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 13 | 0.18 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 13 | 0.18 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 13 | 0.18 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 20 | 0.18 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 20 | 0.18 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 20 | 0.18 |
| (1,438) | 1:A:47:LYS:HA | 1:A:44:ARG:HA | 7 | 0.18 |
| (1,395) | 1:A:110:SER:HA | 1:A:113:ASN:HB3 | 10 | 0.18 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 4 | 0.18 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 7 | 0.18 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 10 | 0.18 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 18 | 0.18 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 20 | 0.18 |
| (1,342) | 1:A:7:SER:HB3 | 1:A:7:SER:HA | 1 | 0.18 |
| (1,342) | 1:A:7:SER:HB3 | 1:A:7:SER:HA | 2 | 0.18 |
| (1,342) | 1:A:7:SER:HB3 | 1:A:7:SER:HA | 3 | 0.18 |
| (1,342) | 1:A:7:SER:HB3 | 1:A:7:SER:HA | 4 | 0.18 |
| (1,342) | 1:A:7:SER:HB3 | 1:A:7:SER:HA | 5 | 0.18 |
| (1,342) | 1:A:7:SER:HB3 | 1:A:7:SER:HA | 6 | 0.18 |
| (1,342) | 1:A:7:SER:HB3 | 1:A:7:SER:HA | 7 | 0.18 |
| (1,342) | 1:A:7:SER:HB3 | 1:A:7:SER:HA | 8 | 0.18 |
| (1,342) | 1:A:7:SER:HB3 | 1:A:7:SER:HA | 12 | 0.18 |
| (1,342) | 1:A:7:SER:HB3 | 1:A:7:SER:HA | 13 | 0.18 |
| (1,342) | 1:A:7:SER:HB3 | 1:A:7:SER:HA | 14 | 0.18 |
| (1,342) | 1:A:7:SER:HB3 | 1:A:7:SER:HA | 15 | 0.18 |
| (1,342) | 1:A:7:SER:HB3 | 1:A:7:SER:HA | 16 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,342) | 1:A:7:SER:HB3 | 1:A:7:SER:HA | 18 | 0.18 |
| (1,342) | 1:A:7:SER:HB3 | 1:A:7:SER:HA | 19 | 0.18 |
| (1,342) | 1:A:7:SER:HB3 | 1:A:7:SER:HA | 20 | 0.18 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 1 | 0.18 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 5 | 0.18 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 8 | 0.18 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 3 | 0.18 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 3 | 0.18 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 3 | 0.18 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 14 | 0.18 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 15 | 0.18 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 17 | 0.18 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 0.18 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 0.18 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 0.18 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 0.18 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 0.18 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 0.18 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 11 | 0.18 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 11 | 0.18 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 11 | 0.18 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 14 | 0.18 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 11 | 0.18 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 5 | 0.18 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 5 | 0.18 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 5 | 0.18 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 6 | 0.18 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 6 | 0.18 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 6 | 0.18 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 16 | 0.18 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 16 | 0.18 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 16 | 0.18 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 7 | 0.18 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 8 | 0.18 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 2 | 0.18 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 2 | 0.18 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 2 | 0.18 |
| (1,2179) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HG2 | 1 | 0.18 |
| (1,2179) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HG2 | 9 | 0.18 |
| (1,2179) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HG2 | 11 | 0.18 |
| (1,2179) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HG2 | 19 | 0.18 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 9 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 9 | 0.18 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 9 | 0.18 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 15 | 0.18 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 15 | 0.18 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 15 | 0.18 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 18 | 0.18 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 18 | 0.18 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 18 | 0.18 |
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 15 | 0.18 |
| (1,216) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HG2 | 9 | 0.18 |
| (1,216) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HG2 | 17 | 0.18 |
| (1,2158) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 1 | 0.18 |
| (1,2158) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 4 | 0.18 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 5 | 0.18 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 5 | 0.18 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 5 | 0.18 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 17 | 0.18 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 17 | 0.18 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 17 | 0.18 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG12 | 16 | 0.18 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG11 | 16 | 0.18 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG13 | 16 | 0.18 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 2 | 0.18 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 2 | 0.18 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 2 | 0.18 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 11 | 0.18 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 11 | 0.18 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 11 | 0.18 |
| (1,2043) | 1:A:90:THR:H | 1:A:89:ASN:HB3 | 9 | 0.18 |
| (1,2043) | 1:A:90:THR:H | 1:A:89:ASN:HB3 | 16 | 0.18 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 11 | 0.18 |
| (1,2005) | 1:A:127:SER:H | 1:A:126:ALA:HA | 16 | 0.18 |
| (1,1924) | 1:A:85:PHE:H | 1:A:84:ASN:HB3 | 14 | 0.18 |
| (1,1922) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 8 | 0.18 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 16 | 0.18 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 16 | 0.18 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 16 | 0.18 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 15 | 0.18 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 2 | 0.18 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 5 | 0.18 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 5 | 0.18 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 5 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 8 | 0.18 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 8 | 0.18 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 20 | 0.18 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 20 | 0.18 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 20 | 0.18 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 7 | 0.18 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 8 | 0.18 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 12 | 0.18 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 13 | 0.18 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 16 | 0.18 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 20 | 0.18 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 2 | 0.18 |
| (1,1643) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG3 | 6 | 0.18 |
| (1,1643) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG3 | 15 | 0.18 |
| (1,1642) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 11 | 0.18 |
| (1,1642) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 15 | 0.18 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 4 | 0.18 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 11 | 0.18 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 19 | 0.18 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 1 | 0.18 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 9 | 0.18 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 11 | 0.18 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 19 | 0.18 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 20 | 0.18 |
| (1,1556) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 17 | 0.18 |
| (1,1531) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 12 | 0.18 |
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 8 | 0.18 |
| (1,1455) | 1:A:141:ALA:H | 1:A:140:GLU:HB3 | 12 | 0.18 |
| (1,1420) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:144:ILE:HB | 4 | 0.18 |
| (1,141) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:66:PHE:HD1 | 16 | 0.18 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:123:PHE:H | 8 | 0.18 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:123:PHE:H | 8 | 0.18 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:123:PHE:H | 8 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 2 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 2 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 2 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 5 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 5 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 5 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 6 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 6 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 6 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 9 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 9 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 9 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 11 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 11 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 11 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 13 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 13 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 13 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 14 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 14 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 14 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 17 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 17 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 17 | 0.18 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HA | 1 | 0.18 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HA | 1 | 0.18 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HA | 1 | 0.18 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HA | 12 | 0.18 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HA | 12 | 0.18 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HA | 12 | 0.18 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 5 | 0.18 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 5 | 0.18 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 5 | 0.18 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 8 | 0.18 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 8 | 0.18 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 8 | 0.18 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 18 | 0.18 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 18 | 0.18 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 18 | 0.18 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 20 | 0.18 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 20 | 0.18 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 20 | 0.18 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:LYS:HA | 17 | 0.18 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:47:LYS:HA | 17 | 0.18 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:47:LYS:HA | 17 | 0.18 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:LYS:HA | 19 | 0.18 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:47:LYS:HA | 19 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:47:LYS:HA | 19 | 0.18 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 6 | 0.18 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 6 | 0.18 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 6 | 0.18 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 12 | 0.18 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 12 | 0.18 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 12 | 0.18 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 18 | 0.18 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 18 | 0.18 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 18 | 0.18 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HD2 | 10 | 0.18 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HD2 | 10 | 0.18 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HD2 | 10 | 0.18 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD12 | 2 | 0.18 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD11 | 2 | 0.18 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD13 | 2 | 0.18 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 19 | 0.18 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 19 | 0.18 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 19 | 0.18 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 4 | 0.18 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 4 | 0.18 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 4 | 0.18 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 8 | 0.18 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 8 | 0.18 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 8 | 0.18 |
| (1,1207) | 1:A:138:ILE:H | 1:A:138:ILE:HG22 | 9 | 0.18 |
| (1,1207) | 1:A:138:ILE:H | 1:A:138:ILE:HG21 | 9 | 0.18 |
| (1,1207) | 1:A:138:ILE:H | 1:A:138:ILE:HG23 | 9 | 0.18 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 2 | 0.18 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 2 | 0.18 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 2 | 0.18 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 8 | 0.18 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 8 | 0.18 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 8 | 0.18 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 1 | 0.18 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 1 | 0.18 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 1 | 0.18 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 2 | 0.18 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 2 | 0.18 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 2 | 0.18 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 3 | 0.18 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 3 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 3 | 0.18 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 5 | 0.18 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 5 | 0.18 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 5 | 0.18 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 9 | 0.18 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 9 | 0.18 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 9 | 0.18 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 4 | 0.18 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 4 | 0.18 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 4 | 0.18 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 12 | 0.18 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 12 | 0.18 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 12 | 0.18 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:72:ASN:HD21 | 15 | 0.18 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:72:ASN:HD21 | 15 | 0.18 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:72:ASN:HD21 | 15 | 0.18 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:72:ASN:HD21 | 18 | 0.18 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:72:ASN:HD21 | 18 | 0.18 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:72:ASN:HD21 | 18 | 0.18 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 13 | 0.18 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 13 | 0.18 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 13 | 0.18 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 1 | 0.18 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 17 | 0.18 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 18 | 0.18 |
| (1,1019) | 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:105:PHE:H | 1 | 0.18 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 19 | 0.17 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 19 | 0.17 |
| (2,85) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HG2 | 20 | 0.17 |
| (2,85) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:56:ARG:HG2 | 20 | 0.17 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 4 | 0.17 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 4 | 0.17 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 4 | 0.17 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 12 | 0.17 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 12 | 0.17 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 12 | 0.17 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 15 | 0.17 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 15 | 0.17 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 15 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 5 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 5 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 5 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|-------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 5 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 5 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 5 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 5 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 5 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 5 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 5 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 5 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 5 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 8 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 8 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 8 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 8 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 8 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 8 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 8 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 8 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 8 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 8 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 8 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 8 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 10 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 10 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 10 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 10 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 10 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 10 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 10 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 10 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 10 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 10 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 10 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 10 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 20 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 20 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 20 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 20 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 20 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 20 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 20 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 20 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 20 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 20 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 20 | 0.17 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 20 | 0.17 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:20:LYS:HB3 | 5 | 0.17 |
| (2,549) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 5 | 0.17 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 6 | 0.17 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 6 | 0.17 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 6 | 0.17 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 6 | 0.17 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG21 | 5 | 0.17 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG22 | 5 | 0.17 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG23 | 5 | 0.17 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG21 | 5 | 0.17 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG22 | 5 | 0.17 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG23 | 5 | 0.17 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:92:CYS:HB2 | 15 | 0.17 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:91:ASN:HB2 | 15 | 0.17 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 2 | 0.17 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 2 | 0.17 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 2 | 0.17 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 2 | 0.17 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 2 | 0.17 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 2 | 0.17 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 10 | 0.17 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 10 | 0.17 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 10 | 0.17 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 10 | 0.17 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 10 | 0.17 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 10 | 0.17 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 12 | 0.17 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 12 | 0.17 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 12 | 0.17 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 12 | 0.17 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 12 | 0.17 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 12 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 2 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 2 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 3 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 3 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 5 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 5 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 7 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 7 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 8 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 8 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 10 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 10 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 11 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 11 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 12 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 12 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 15 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 15 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 17 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 17 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 19 | 0.17 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 19 | 0.17 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:44:ARG:HG2 | 12 | 0.17 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG2 | 12 | 0.17 |
| (2,426) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:46:ILE:HG13 | 12 | 0.17 |
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG2 | 8 | 0.17 |
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG3 | 8 | 0.17 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 15 | 0.17 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 15 | 0.17 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 15 | 0.17 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 15 | 0.17 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 15 | 0.17 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 15 | 0.17 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 17 | 0.17 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 17 | 0.17 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 17 | 0.17 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 17 | 0.17 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 17 | 0.17 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 17 | 0.17 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 12 | 0.17 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 12 | 0.17 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 12 | 0.17 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 12 | 0.17 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 12 | 0.17 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 12 | 0.17 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 12 | 0.17 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 12 | 0.17 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 12 | 0.17 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 15 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 15 | 0.17 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 15 | 0.17 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 15 | 0.17 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 15 | 0.17 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 15 | 0.17 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 15 | 0.17 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 15 | 0.17 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 15 | 0.17 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:92:CYS:HB3 | 7 | 0.17 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:92:CYS:HB3 | 7 | 0.17 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:92:CYS:HB3 | 7 | 0.17 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HB2 | 7 | 0.17 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HB2 | 7 | 0.17 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HB2 | 7 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 9 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 9 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 9 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 9 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 9 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 9 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 14 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 14 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 14 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 14 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 14 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 14 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 15 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 15 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 15 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 15 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 15 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 15 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 17 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 17 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 17 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 17 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 17 | 0.17 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 17 | 0.17 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 5 | 0.17 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 5 | 0.17 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 5 | 0.17 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 5 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 5 | 0.17 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 5 | 0.17 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 7 | 0.17 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 7 | 0.17 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 7 | 0.17 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 7 | 0.17 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 7 | 0.17 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 7 | 0.17 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:121:ARG:HB3 | 9 | 0.17 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:121:ARG:HB3 | 9 | 0.17 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:121:ARG:HB3 | 9 | 0.17 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:36:ILE:HB | 9 | 0.17 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:36:ILE:HB | 9 | 0.17 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:36:ILE:HB | 9 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 5 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 5 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 5 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 5 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 5 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 5 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 7 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 7 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 7 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 7 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 7 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 7 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 17 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 17 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 17 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 17 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 17 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 17 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 20 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 20 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 20 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 20 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 20 | 0.17 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 20 | 0.17 |
| (2,328) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 0.17 |
| (2,328) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 0.17 |
| (2,328) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 0.17 |
| (2,328) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:31:GLU:HG2 | 8 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,328) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:31:GLU:HG2 | 8 | 0.17 |
| (2,328) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:31:GLU:HG2 | 8 | 0.17 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 11 | 0.17 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 11 | 0.17 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 11 | 0.17 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 11 | 0.17 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 11 | 0.17 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 11 | 0.17 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 17 | 0.17 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 17 | 0.17 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 17 | 0.17 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 17 | 0.17 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 17 | 0.17 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 17 | 0.17 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 8 | 0.17 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 8 | 0.17 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 8 | 0.17 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 8 | 0.17 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 8 | 0.17 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 8 | 0.17 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 13 | 0.17 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 13 | 0.17 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 13 | 0.17 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 13 | 0.17 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 13 | 0.17 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 13 | 0.17 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:H | 8 | 0.17 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:H | 8 | 0.17 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:H | 8 | 0.17 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:32:LEU:H | 8 | 0.17 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:32:LEU:H | 8 | 0.17 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:32:LEU:H | 8 | 0.17 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 5 | 0.17 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 5 | 0.17 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 5 | 0.17 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:119:LYS:H | 5 | 0.17 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:119:LYS:H | 5 | 0.17 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:119:LYS:H | 5 | 0.17 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 10 | 0.17 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 10 | 0.17 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 10 | 0.17 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:119:LYS:H | 10 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:119:LYS:H | 10 | 0.17 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:119:LYS:H | 10 | 0.17 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 16 | 0.17 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 16 | 0.17 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 16 | 0.17 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:119:LYS:H | 16 | 0.17 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:119:LYS:H | 16 | 0.17 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:119:LYS:H | 16 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:25:GLU:HB3 | 1:A:18:THR:HG21 | 18 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:25:GLU:HB3 | 1:A:18:THR:HG22 | 18 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:25:GLU:HB3 | 1:A:18:THR:HG23 | 18 | 0.17 |
| (2,294) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:45:LYS:HG3 | 18 | 0.17 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:4:LYS:HA | 9 | 0.17 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:4:LYS:HA | 9 | 0.17 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:4:LYS:HA | 15 | 0.17 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:4:LYS:HA | 15 | 0.17 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:4:LYS:HA | 19 | 0.17 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:4:LYS:HA | 19 | 0.17 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 6 | 0.17 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 6 | 0.17 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 3 | 0.17 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 3 | 0.17 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 4 | 0.17 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 4 | 0.17 |
| (2,238) | 1:A:85:PHE:HB3 | 1:A:76:LYS:H | 9 | 0.17 |
| (2,238) | 1:A:85:PHE:HB3 | 1:A:86:ASN:H | 9 | 0.17 |
| (2,238) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:76:LYS:H | 9 | 0.17 |
| (2,238) | 1:A:85:PHE:HB3 | 1:A:76:LYS:H | 14 | 0.17 |
| (2,238) | 1:A:85:PHE:HB3 | 1:A:86:ASN:H | 14 | 0.17 |
| (2,238) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:76:LYS:H | 14 | 0.17 |
| (2,238) | 1:A:85:PHE:HB3 | 1:A:76:LYS:H | 17 | 0.17 |
| (2,238) | 1:A:85:PHE:HB3 | 1:A:86:ASN:H | 17 | 0.17 |
| (2,238) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:76:LYS:H | 17 | 0.17 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 2 | 0.17 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 2 | 0.17 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 5 | 0.17 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 5 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 1 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 1 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 1 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 1 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 1 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 1 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 5 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 5 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 5 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 5 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 5 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 5 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 6 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 6 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 6 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 6 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 6 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 6 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 15 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 15 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 15 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 15 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 15 | 0.17 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 15 | 0.17 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD22 | 3 | 0.17 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD21 | 3 | 0.17 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD23 | 3 | 0.17 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 3 | 0.17 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 3 | 0.17 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 3 | 0.17 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 3 | 0.17 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 3 | 0.17 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 3 | 0.17 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG3 | 15 | 0.17 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG2 | 15 | 0.17 |
| (2,181) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 0.17 |
| (2,181) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 8 | 0.17 |
| (2,175) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:98:ILE:HD12 | 1 | 0.17 |
| (2,175) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:98:ILE:HD11 | 1 | 0.17 |
| (2,175) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:98:ILE:HD13 | 1 | 0.17 |
| (2,175) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG12 | 1 | 0.17 |
| (2,170) | 1:A:58:CYS:HA | 1:A:20:LYS:HB2 | 3 | 0.17 |
| (2,170) | 1:A:58:CYS:HA | 1:A:20:LYS:HB3 | 3 | 0.17 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 10 | 0.17 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 10 | 0.17 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 10 | 0.17 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 13 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 13 | 0.17 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 13 | 0.17 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE2 | 1:A:138:ILE:HB | 2 | 0.17 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE1 | 1:A:138:ILE:HB | 2 | 0.17 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE2 | 1:A:138:ILE:HB | 3 | 0.17 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE1 | 1:A:138:ILE:HB | 3 | 0.17 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HE1 | 2 | 0.17 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HE1 | 2 | 0.17 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HE1 | 4 | 0.17 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HE1 | 4 | 0.17 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HE1 | 17 | 0.17 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HE1 | 17 | 0.17 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD22 | 13 | 0.17 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD21 | 13 | 0.17 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD23 | 13 | 0.17 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD22 | 16 | 0.17 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD21 | 16 | 0.17 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD23 | 16 | 0.17 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD22 | 18 | 0.17 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD21 | 18 | 0.17 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD23 | 18 | 0.17 |
| (1,936) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:124:GLU:H | 15 | 0.17 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 5 | 0.17 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 10 | 0.17 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 2 | 0.17 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 8 | 0.17 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 19 | 0.17 |
| (1,836) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 11 | 0.17 |
| (1,808) | 1:A:145:GLU:HG3 | 1:A:145:GLU:HA | 6 | 0.17 |
| (1,740) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:19:ASN:HB3 | 9 | 0.17 |
| (1,74) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:113:ASN:HA | 2 | 0.17 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 8 | 0.17 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 20 | 0.17 |
| (1,735) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB3 | 13 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 2 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 4 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 6 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 8 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 11 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 13 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 16 | 0.17 |
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 17 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 19 | 0.17 |
| (1,678) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 10 | 0.17 |
| (1,656) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:53:ASP:H | 19 | 0.17 |
| (1,570) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:137:ASP:H | 19 | 0.17 |
| (1,552) | 1:A:137:ASP:HA | 1:A:138:ILE:HA | 6 | 0.17 |
| (1,527) | 1:A:145:GLU:HA | 1:A:146:TRP:HB3 | 8 | 0.17 |
| (1,48) | 1:A:146:TRP:HD1 | 1:A:147:HIS:HA | 16 | 0.17 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 9 | 0.17 |
| (1,464) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:107:GLN:HG3 | 19 | 0.17 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 1 | 0.17 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 1 | 0.17 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 1 | 0.17 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 14 | 0.17 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 14 | 0.17 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 14 | 0.17 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 18 | 0.17 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 18 | 0.17 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 18 | 0.17 |
| (1,438) | 1:A:47:LYS:HA | 1:A:44:ARG:HA | 11 | 0.17 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 1 | 0.17 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 2 | 0.17 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 3 | 0.17 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 5 | 0.17 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 13 | 0.17 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 19 | 0.17 |
| (1,342) | 1:A:7:SER:HB3 | 1:A:7:SER:HA | 9 | 0.17 |
| (1,342) | 1:A:7:SER:HB3 | 1:A:7:SER:HA | 10 | 0.17 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 9 | 0.17 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 11 | 0.17 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 11 | 0.17 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 11 | 0.17 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 15 | 0.17 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 15 | 0.17 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 15 | 0.17 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 18 | 0.17 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 18 | 0.17 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 18 | 0.17 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 1 | 0.17 |
| (1,232) | 1:A:123:PHE:HD1 | 1:A:47:LYS:HG2 | 14 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 9 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 9 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 9 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 9 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 9 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 9 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 9 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 9 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 9 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 17 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 17 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 17 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 17 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 17 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 17 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 17 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 17 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 17 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 18 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 18 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 18 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 18 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 18 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 18 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 18 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 18 | 0.17 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 18 | 0.17 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 10 | 0.17 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 10 | 0.17 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 10 | 0.17 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 2 | 0.17 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 20 | 0.17 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 15 | 0.17 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 16 | 0.17 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 7 | 0.17 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 7 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 7 | 0.17 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 19 | 0.17 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 19 | 0.17 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 19 | 0.17 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 18 | 0.17 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 15 | 0.17 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 15 | 0.17 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 15 | 0.17 |
| (1,2179) | 1:A:39:SER:H | 1:A:38:LYS:HG2 | 7 | 0.17 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 13 | 0.17 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 13 | 0.17 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 13 | 0.17 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 19 | 0.17 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 19 | 0.17 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 19 | 0.17 |
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 2 | 0.17 |
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 7 | 0.17 |
| (1,216) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HG2 | 15 | 0.17 |
| (1,2158) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HD22 | 20 | 0.17 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 13 | 0.17 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 6 | 0.17 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 6 | 0.17 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 6 | 0.17 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 8 | 0.17 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 8 | 0.17 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 8 | 0.17 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG12 | 3 | 0.17 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG11 | 3 | 0.17 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG13 | 3 | 0.17 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG12 | 11 | 0.17 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG11 | 11 | 0.17 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG13 | 11 | 0.17 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG12 | 13 | 0.17 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG11 | 13 | 0.17 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG13 | 13 | 0.17 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 3 | 0.17 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 7 | 0.17 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 10 | 0.17 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 20 | 0.17 |
| (1,1809) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:35:GLU:HG3 | 8 | 0.17 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 5 | 0.17 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 5 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 5 | 0.17 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 8 | 0.17 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 8 | 0.17 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 8 | 0.17 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 19 | 0.17 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 19 | 0.17 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 19 | 0.17 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 17 | 0.17 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 7 | 0.17 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 19 | 0.17 |
| (1,1722) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:49:GLN:HE21 | 8 | 0.17 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 9 | 0.17 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 9 | 0.17 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 9 | 0.17 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 14 | 0.17 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 14 | 0.17 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 14 | 0.17 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 11 | 0.17 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 14 | 0.17 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 15 | 0.17 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 19 | 0.17 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 3 | 0.17 |
| (1,1643) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG3 | 19 | 0.17 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 5 | 0.17 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 13 | 0.17 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 14 | 0.17 |
| (1,1578) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:138:ILE:HG22 | 12 | 0.17 |
| (1,1578) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:138:ILE:HG21 | 12 | 0.17 |
| (1,1578) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:138:ILE:HG23 | 12 | 0.17 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 12 | 0.17 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 14 | 0.17 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 3 | 0.17 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 10 | 0.17 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 12 | 0.17 |
| (1,1556) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 3 | 0.17 |
| (1,1542) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 18 | 0.17 |
| (1,1530) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:6:PHE:HD1 | 10 | 0.17 |
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 1 | 0.17 |
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 2 | 0.17 |
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 3 | 0.17 |
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 12 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 13 | 0.17 |
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 15 | 0.17 |
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 16 | 0.17 |
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 20 | 0.17 |
| (1,1420) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:144:ILE:HB | 18 | 0.17 |
| (1,141) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:66:PHE:HD1 | 1 | 0.17 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 7 | 0.17 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 7 | 0.17 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 7 | 0.17 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 16 | 0.17 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 16 | 0.17 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 16 | 0.17 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 18 | 0.17 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 18 | 0.17 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 18 | 0.17 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:32:LEU:HB3 | 19 | 0.17 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:32:LEU:HB3 | 19 | 0.17 |
| (1,1371) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:32:LEU:HB3 | 19 | 0.17 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HA | 11 | 0.17 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HA | 11 | 0.17 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HA | 11 | 0.17 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:123:PHE:HD2 | 18 | 0.17 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:123:PHE:HD2 | 18 | 0.17 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:123:PHE:HD2 | 18 | 0.17 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 1 | 0.17 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 1 | 0.17 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 1 | 0.17 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 4 | 0.17 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 4 | 0.17 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 4 | 0.17 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:LYS:HA | 1 | 0.17 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:47:LYS:HA | 1 | 0.17 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:47:LYS:HA | 1 | 0.17 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:74:ARG:H | 19 | 0.17 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:74:ARG:H | 19 | 0.17 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:74:ARG:H | 19 | 0.17 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HD2 | 5 | 0.17 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HD2 | 5 | 0.17 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HD2 | 5 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 1 | 0.17 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 1 | 0.17 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 1 | 0.17 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 4 | 0.17 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 4 | 0.17 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 4 | 0.17 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 9 | 0.17 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 9 | 0.17 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 9 | 0.17 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 13 | 0.17 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 13 | 0.17 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 13 | 0.17 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 20 | 0.17 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 20 | 0.17 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 20 | 0.17 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 20 | 0.17 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 20 | 0.17 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 20 | 0.17 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 1 | 0.17 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 1 | 0.17 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 1 | 0.17 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 5 | 0.17 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 5 | 0.17 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 5 | 0.17 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 9 | 0.17 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 9 | 0.17 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 9 | 0.17 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 5 | 0.17 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 5 | 0.17 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 5 | 0.17 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 8 | 0.17 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 8 | 0.17 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 8 | 0.17 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 13 | 0.17 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 13 | 0.17 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 13 | 0.17 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 17 | 0.17 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 17 | 0.17 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 17 | 0.17 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 20 | 0.17 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 20 | 0.17 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 20 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 1 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD11 | 1 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD13 | 1 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD12 | 1 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 1 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD13 | 1 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD12 | 1 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD11 | 1 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD13 | 1 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 4 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD11 | 4 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD13 | 4 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD12 | 4 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 4 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD13 | 4 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD12 | 4 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD11 | 4 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD13 | 4 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 8 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD11 | 8 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD13 | 8 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD12 | 8 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 8 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD13 | 8 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD12 | 8 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD11 | 8 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD13 | 8 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 13 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD11 | 13 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD13 | 13 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD12 | 13 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 13 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD13 | 13 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD12 | 13 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD11 | 13 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD13 | 13 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 14 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD11 | 14 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD13 | 14 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD12 | 14 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 14 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD13 | 14 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD12 | 14 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD11 | 14 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD13 | 14 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 15 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD11 | 15 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD13 | 15 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD12 | 15 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 15 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD13 | 15 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD12 | 15 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD11 | 15 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD13 | 15 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 17 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD11 | 17 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD13 | 17 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD12 | 17 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 17 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD13 | 17 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD12 | 17 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD11 | 17 | 0.17 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD13 | 17 | 0.17 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE2 | 10 | 0.17 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE1 | 10 | 0.17 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE3 | 10 | 0.17 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE2 | 10 | 0.17 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE1 | 10 | 0.17 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE3 | 10 | 0.17 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE2 | 10 | 0.17 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE1 | 10 | 0.17 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE3 | 10 | 0.17 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 7 | 0.17 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 7 | 0.17 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 7 | 0.17 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 17 | 0.17 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 17 | 0.17 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 17 | 0.17 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 18 | 0.17 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 18 | 0.17 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 18 | 0.17 |
| (1,116) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 5 | 0.17 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 5 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 5 | 0.17 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD12 | 15 | 0.17 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD11 | 15 | 0.17 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD13 | 15 | 0.17 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD12 | 15 | 0.17 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD11 | 15 | 0.17 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD13 | 15 | 0.17 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD12 | 15 | 0.17 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD11 | 15 | 0.17 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD13 | 15 | 0.17 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:36:ILE:H | 20 | 0.17 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:36:ILE:H | 20 | 0.17 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:36:ILE:H | 20 | 0.17 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:72:ASN:HD21 | 1 | 0.17 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:72:ASN:HD21 | 1 | 0.17 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:72:ASN:HD21 | 1 | 0.17 |
| (1,1035) | 1:A:74:ARG:HG2 | 1:A:74:ARG:HA | 8 | 0.17 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 3 | 0.17 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 3 | 0.17 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 3 | 0.17 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 5 | 0.17 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 5 | 0.17 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 5 | 0.17 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 9 | 0.17 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 9 | 0.17 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 9 | 0.17 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 11 | 0.17 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 11 | 0.17 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 11 | 0.17 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 4 | 0.17 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 8 | 0.17 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 11 | 0.17 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 13 | 0.17 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 19 | 0.17 |
| (1,1019) | 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:105:PHE:H | 2 | 0.17 |
| (1,1019) | 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:105:PHE:H | 5 | 0.17 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 4 | 0.16 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 4 | 0.16 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 5 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 5 | 0.16 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 14 | 0.16 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 14 | 0.16 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 1 | 0.16 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 1 | 0.16 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 1 | 0.16 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 11 | 0.16 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 11 | 0.16 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 11 | 0.16 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 16 | 0.16 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 16 | 0.16 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 16 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 13 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 13 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 13 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 13 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 13 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 13 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 13 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 13 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 13 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 13 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 13 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 13 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 15 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 15 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 15 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 15 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 15 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 15 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 15 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 15 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 15 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 15 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 15 | 0.16 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 15 | 0.16 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 18 | 0.16 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 18 | 0.16 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 18 | 0.16 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 18 | 0.16 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 18 | 0.16 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 18 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,548) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:20:LYS:HD3 | 7 | 0.16 |
| (2,548) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:56:ARG:HB3 | 7 | 0.16 |
| (2,548) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HB | 7 | 0.16 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 8 | 0.16 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 8 | 0.16 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 8 | 0.16 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 8 | 0.16 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 13 | 0.16 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 13 | 0.16 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 13 | 0.16 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 13 | 0.16 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 20 | 0.16 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 20 | 0.16 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 20 | 0.16 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 20 | 0.16 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HB | 2 | 0.16 |
| (2,509) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:49:GLN:HB3 | 2 | 0.16 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:92:CYS:HB2 | 12 | 0.16 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:91:ASN:HB2 | 12 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 4 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 4 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 4 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 4 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 4 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 4 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 7 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 7 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 7 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 7 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 7 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 7 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 13 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 13 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 13 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 13 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 13 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 13 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 15 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 15 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 15 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 15 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 15 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 15 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 16 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 16 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 16 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 16 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 16 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 16 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 20 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 20 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 20 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 20 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 20 | 0.16 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 20 | 0.16 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 4 | 0.16 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 4 | 0.16 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 6 | 0.16 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 6 | 0.16 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 13 | 0.16 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 13 | 0.16 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 16 | 0.16 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 16 | 0.16 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD1 | 18 | 0.16 |
| (2,445) | 1:A:102:TYR:H | 1:A:102:TYR:HD2 | 18 | 0.16 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG3 | 5 | 0.16 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 5 | 0.16 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 10 | 0.16 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 10 | 0.16 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 10 | 0.16 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB2 | 10 | 0.16 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB1 | 10 | 0.16 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB3 | 10 | 0.16 |
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG2 | 6 | 0.16 |
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG3 | 6 | 0.16 |
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG2 | 11 | 0.16 |
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG3 | 11 | 0.16 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB3 | 2 | 0.16 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB3 | 2 | 0.16 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB3 | 2 | 0.16 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB2 | 2 | 0.16 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB2 | 2 | 0.16 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB2 | 2 | 0.16 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB3 | 11 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB3 | 11 | 0.16 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB3 | 11 | 0.16 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB2 | 11 | 0.16 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB2 | 11 | 0.16 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB2 | 11 | 0.16 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB3 | 20 | 0.16 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB3 | 20 | 0.16 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB3 | 20 | 0.16 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB2 | 20 | 0.16 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB2 | 20 | 0.16 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB2 | 20 | 0.16 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 19 | 0.16 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 19 | 0.16 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 19 | 0.16 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 19 | 0.16 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 19 | 0.16 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 19 | 0.16 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 19 | 0.16 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 19 | 0.16 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 19 | 0.16 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:92:CYS:HB3 | 18 | 0.16 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:92:CYS:HB3 | 18 | 0.16 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:92:CYS:HB3 | 18 | 0.16 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HB2 | 18 | 0.16 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HB2 | 18 | 0.16 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HB2 | 18 | 0.16 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:92:CYS:HB3 | 20 | 0.16 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:92:CYS:HB3 | 20 | 0.16 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:92:CYS:HB3 | 20 | 0.16 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HB2 | 20 | 0.16 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HB2 | 20 | 0.16 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HB2 | 20 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 1 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 1 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 1 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 1 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 1 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 1 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 2 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 2 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 2 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 2 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|--------------|----------|---------------|
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 2 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 2 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 6 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 6 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 6 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 6 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 6 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 6 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 8 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 8 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 8 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 8 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 8 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 8 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 10 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 10 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 10 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 10 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 10 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 10 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 16 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 16 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 16 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 16 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 16 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 16 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 18 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 18 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 18 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 18 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 18 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 18 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 19 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 19 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 19 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 19 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 19 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 19 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 20 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 20 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 20 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 20 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 20 | 0.16 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 20 | 0.16 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 18 | 0.16 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 18 | 0.16 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 18 | 0.16 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 18 | 0.16 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 18 | 0.16 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 18 | 0.16 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 3 | 0.16 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 3 | 0.16 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 3 | 0.16 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 3 | 0.16 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 3 | 0.16 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 3 | 0.16 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 8 | 0.16 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 8 | 0.16 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 8 | 0.16 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 8 | 0.16 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 8 | 0.16 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 8 | 0.16 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:121:ARG:HB3 | 11 | 0.16 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:121:ARG:HB3 | 11 | 0.16 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:121:ARG:HB3 | 11 | 0.16 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:36:ILE:HB | 11 | 0.16 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:36:ILE:HB | 11 | 0.16 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:36:ILE:HB | 11 | 0.16 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:85:PHE:HE1 | 5 | 0.16 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:85:PHE:HE1 | 5 | 0.16 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:85:PHE:HE1 | 5 | 0.16 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG22 | 5 | 0.16 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG21 | 5 | 0.16 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG23 | 5 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 2 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 2 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 2 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 2 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 2 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 2 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 7 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 7 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 7 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 7 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 7 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 7 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 8 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 8 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 8 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 8 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 8 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 8 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 14 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 14 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 14 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 14 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 14 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 14 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 18 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 18 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 18 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 18 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 18 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 18 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 20 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 20 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 20 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 20 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 20 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 20 | 0.16 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:H | 3 | 0.16 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:H | 3 | 0.16 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:H | 3 | 0.16 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:32:LEU:H | 3 | 0.16 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:32:LEU:H | 3 | 0.16 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:32:LEU:H | 3 | 0.16 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:H | 19 | 0.16 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:H | 19 | 0.16 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:H | 19 | 0.16 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:32:LEU:H | 19 | 0.16 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:32:LEU:H | 19 | 0.16 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:32:LEU:H | 19 | 0.16 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 11 | 0.16 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 11 | 0.16 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 11 | 0.16 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:119:LYS:H | 11 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:119:LYS:H | 11 | 0.16 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:119:LYS:H | 11 | 0.16 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 19 | 0.16 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 19 | 0.16 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 19 | 0.16 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:119:LYS:H | 19 | 0.16 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:119:LYS:H | 19 | 0.16 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:119:LYS:H | 19 | 0.16 |
| (2,294) | 1:A:25:GLU:HB3 | 1:A:18:THR:HG21 | 5 | 0.16 |
| (2,294) | 1:A:25:GLU:HB3 | 1:A:18:THR:HG22 | 5 | 0.16 |
| (2,294) | 1:A:25:GLU:HB3 | 1:A:18:THR:HG23 | 5 | 0.16 |
| (2,294) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:45:LYS:HG3 | 5 | 0.16 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:4:LYS:HA | 17 | 0.16 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:4:LYS:HA | 17 | 0.16 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 19 | 0.16 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 19 | 0.16 |
| (2,251) | 1:A:5:TYR:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 10 | 0.16 |
| (2,251) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 10 | 0.16 |
| (2,238) | 1:A:85:PHE:HB3 | 1:A:76:LYS:H | 18 | 0.16 |
| (2,238) | 1:A:85:PHE:HB3 | 1:A:86:ASN:H | 18 | 0.16 |
| (2,238) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:76:LYS:H | 18 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 10 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 10 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 10 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 10 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 16 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 16 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 16 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 16 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 20 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 20 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 20 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 20 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 2 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 2 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 2 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 2 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 2 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 2 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 8 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 8 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 8 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 8 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 8 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 8 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 12 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 12 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 12 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 12 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 12 | 0.16 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 12 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD22 | 4 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD21 | 4 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD23 | 4 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 4 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 4 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 4 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 4 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 4 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 4 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD22 | 12 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD21 | 12 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD23 | 12 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 12 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 12 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 12 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 12 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 12 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 12 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD22 | 13 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD21 | 13 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD23 | 13 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 13 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 13 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 13 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 8 | 0.16 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 8 | 0.16 |
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 14 | 0.16 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 14 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD22 | 2 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD21 | 2 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD23 | 2 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD22 | 2 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD21 | 2 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD23 | 2 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD22 | 2 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD21 | 2 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD23 | 2 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD22 | 8 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD21 | 8 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD23 | 8 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD22 | 8 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD21 | 8 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD23 | 8 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD22 | 8 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD21 | 8 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD23 | 8 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD22 | 14 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD21 | 14 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD23 | 14 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD22 | 14 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD21 | 14 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD23 | 14 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD22 | 14 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD21 | 14 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD23 | 14 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.16 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE2 | 1:A:138:ILE:HB | 4 | 0.16 |
| (2,133) | 1:A:139:PHE:HE1 | 1:A:138:ILE:HB | 4 | 0.16 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:101:ILE:HB | 4 | 0.16 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:56:ARG:HB3 | 4 | 0.16 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:101:ILE:HB | 4 | 0.16 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:101:ILE:HB | 10 | 0.16 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:56:ARG:HB3 | 10 | 0.16 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:101:ILE:HB | 10 | 0.16 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:101:ILE:HB | 16 | 0.16 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:56:ARG:HB3 | 16 | 0.16 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:101:ILE:HB | 16 | 0.16 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HE1 | 15 | 0.16 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HE1 | 15 | 0.16 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HE1 | 19 | 0.16 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HE1 | 19 | 0.16 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD22 | 15 | 0.16 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD21 | 15 | 0.16 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD23 | 15 | 0.16 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD22 | 17 | 0.16 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD21 | 17 | 0.16 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD23 | 17 | 0.16 |
| (1,949) | 1:A:87:ILE:HG12 | 1:A:73:MET:HA | 17 | 0.16 |
| (1,936) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:124:GLU:H | 7 | 0.16 |
| (1,933) | 1:A:121:ARG:HB2 | 1:A:121:ARG:HD2 | 2 | 0.16 |
| (1,882) | 1:A:46:ILE:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 10 | 0.16 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 2 | 0.16 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 13 | 0.16 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 18 | 0.16 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 13 | 0.16 |
| (1,813) | 1:A:88:GLU:HG2 | 1:A:73:MET:HA | 6 | 0.16 |
| (1,740) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:19:ASN:HB3 | 18 | 0.16 |
| (1,736) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:37:ASN:HB2 | 12 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,728) | 1:A:136:ASN:HB3 | 1:A:136:ASN:HA | 4 | 0.16 |
| (1,728) | 1:A:136:ASN:HB3 | 1:A:136:ASN:HA | 14 | 0.16 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 1 | 0.16 |
| (1,678) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 2 | 0.16 |
| (1,678) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 3 | 0.16 |
| (1,63) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:109:VAL:HA | 10 | 0.16 |
| (1,63) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:109:VAL:HA | 16 | 0.16 |
| (1,570) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:137:ASP:H | 4 | 0.16 |
| (1,554) | 1:A:147:HIS:HA | 1:A:147:HIS:HD2 | 19 | 0.16 |
| (1,552) | 1:A:137:ASP:HA | 1:A:138:ILE:HA | 10 | 0.16 |
| (1,552) | 1:A:137:ASP:HA | 1:A:138:ILE:HA | 19 | 0.16 |
| (1,527) | 1:A:145:GLU:HA | 1:A:146:TRP:HB3 | 6 | 0.16 |
| (1,51) | 1:A:52:PHE:HD2 | 1:A:66:PHE:HD2 | 19 | 0.16 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 5 | 0.16 |
| (1,475) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:35:GLU:HA | 2 | 0.16 |
| (1,438) | 1:A:47:LYS:HA | 1:A:44:ARG:HA | 2 | 0.16 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 11 | 0.16 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 14 | 0.16 |
| (1,352) | 1:A:11:SER:HB2 | 1:A:12:ALA:H | 16 | 0.16 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 15 | 0.16 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 16 | 0.16 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 17 | 0.16 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 6 | 0.16 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 6 | 0.16 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 6 | 0.16 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG21 | 5 | 0.16 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG22 | 5 | 0.16 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG23 | 5 | 0.16 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG21 | 5 | 0.16 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG22 | 5 | 0.16 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG23 | 5 | 0.16 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG21 | 5 | 0.16 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG22 | 5 | 0.16 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG23 | 5 | 0.16 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG21 | 11 | 0.16 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG22 | 11 | 0.16 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG23 | 11 | 0.16 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG21 | 11 | 0.16 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG22 | 11 | 0.16 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG23 | 11 | 0.16 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG21 | 11 | 0.16 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG22 | 11 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG23 | 11 | 0.16 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 8 | 0.16 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 10 | 0.16 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 13 | 0.16 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 16 | 0.16 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 20 | 0.16 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG22 | 3 | 0.16 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG21 | 3 | 0.16 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG23 | 3 | 0.16 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG22 | 3 | 0.16 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG21 | 3 | 0.16 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG23 | 3 | 0.16 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG22 | 3 | 0.16 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG21 | 3 | 0.16 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG23 | 3 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 15 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 15 | 0.16 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 15 | 0.16 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 19 | 0.16 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 19 | 0.16 |
| (1,2245) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 19 | 0.16 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 1 | 0.16 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 4 | 0.16 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 5 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 9 | 0.16 |
| (1,2223) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:81:LYS:HG3 | 13 | 0.16 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 3 | 0.16 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 3 | 0.16 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 3 | 0.16 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 8 | 0.16 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 8 | 0.16 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 8 | 0.16 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 10 | 0.16 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 10 | 0.16 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 10 | 0.16 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 15 | 0.16 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 15 | 0.16 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 15 | 0.16 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 14 | 0.16 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 4 | 0.16 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 4 | 0.16 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 4 | 0.16 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 9 | 0.16 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 9 | 0.16 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 9 | 0.16 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 18 | 0.16 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 18 | 0.16 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 18 | 0.16 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 5 | 0.16 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 5 | 0.16 |
| (1,2177) | 1:A:39:SER:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 5 | 0.16 |
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 1 | 0.16 |
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 4 | 0.16 |
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 10 | 0.16 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 7 | 0.16 |
| (1,2106) | 1:A:49:GLN:HE22 | 1:A:53:ASP:HB2 | 19 | 0.16 |
| (1,2096) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:59:LEU:HD12 | 14 | 0.16 |
| (1,2096) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:59:LEU:HD11 | 14 | 0.16 |
| (1,2096) | 1:A:16:GLN:HE21 | 1:A:59:LEU:HD13 | 14 | 0.16 |
| (1,2074) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:84:ASN:HA | 8 | 0.16 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 5 | 0.16 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 5 | 0.16 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 5 | 0.16 |
| (1,2043) | 1:A:90:THR:H | 1:A:89:ASN:HB3 | 14 | 0.16 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 19 | 0.16 |
| (1,2005) | 1:A:127:SER:H | 1:A:126:ALA:HA | 13 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1858) | 1:A:71:ASN:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 5 | 0.16 |
| (1,1855) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HD12 | 3 | 0.16 |
| (1,1855) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HD11 | 3 | 0.16 |
| (1,1855) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HD13 | 3 | 0.16 |
| (1,1853) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:136:ASN:HB2 | 2 | 0.16 |
| (1,1853) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:136:ASN:HB2 | 7 | 0.16 |
| (1,1850) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 11 | 0.16 |
| (1,1850) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 20 | 0.16 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 17 | 0.16 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 4 | 0.16 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 4 | 0.16 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 4 | 0.16 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 6 | 0.16 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 6 | 0.16 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 6 | 0.16 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 18 | 0.16 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 18 | 0.16 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 18 | 0.16 |
| (1,1741) | 1:A:30:ASP:H | 1:A:33:VAL:HB | 8 | 0.16 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 1 | 0.16 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 4 | 0.16 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 13 | 0.16 |
| (1,1700) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:67:ILE:HB | 2 | 0.16 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 1 | 0.16 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 1 | 0.16 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 1 | 0.16 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 15 | 0.16 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 15 | 0.16 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 15 | 0.16 |
| (1,1685) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:53:ASP:HB2 | 4 | 0.16 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 9 | 0.16 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 5 | 0.16 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 6 | 0.16 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 8 | 0.16 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 11 | 0.16 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 14 | 0.16 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 18 | 0.16 |
| (1,1585) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG12 | 3 | 0.16 |
| (1,157) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:69:LEU:HG | 7 | 0.16 |
| (1,1556) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 6 | 0.16 |
| (1,1554) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:123:PHE:HB2 | 16 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1532) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,1453) | 1:A:146:TRP:H | 1:A:145:GLU:HB3 | 15 | 0.16 |
| (1,1420) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:144:ILE:HB | 15 | 0.16 |
| (1,141) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:66:PHE:HD1 | 11 | 0.16 |
| (1,141) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:66:PHE:HD1 | 20 | 0.16 |
| (1,1404) | 1:A:12:ALA:H | 1:A:11:SER:HA | 2 | 0.16 |
| (1,1404) | 1:A:12:ALA:H | 1:A:11:SER:HA | 10 | 0.16 |
| (1,1396) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:148:GLU:HB3 | 15 | 0.16 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:123:PHE:H | 11 | 0.16 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:123:PHE:H | 11 | 0.16 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:123:PHE:H | 11 | 0.16 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HA | 7 | 0.16 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HA | 7 | 0.16 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HA | 7 | 0.16 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HA | 17 | 0.16 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HA | 17 | 0.16 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HA | 17 | 0.16 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG21 | 2 | 0.16 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG22 | 2 | 0.16 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG23 | 2 | 0.16 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:LYS:HA | 20 | 0.16 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:47:LYS:HA | 20 | 0.16 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:47:LYS:HA | 20 | 0.16 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 3 | 0.16 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 3 | 0.16 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 3 | 0.16 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 5 | 0.16 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 5 | 0.16 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 5 | 0.16 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 8 | 0.16 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 8 | 0.16 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 8 | 0.16 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 13 | 0.16 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 13 | 0.16 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 13 | 0.16 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 7 | 0.16 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 7 | 0.16 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 7 | 0.16 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 6 | 0.16 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 6 | 0.16 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 6 | 0.16 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 12 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 12 | 0.16 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 12 | 0.16 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 14 | 0.16 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 14 | 0.16 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 14 | 0.16 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 17 | 0.16 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 17 | 0.16 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 17 | 0.16 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 1 | 0.16 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 1 | 0.16 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 1 | 0.16 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 10 | 0.16 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 10 | 0.16 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 10 | 0.16 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 13 | 0.16 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 13 | 0.16 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 13 | 0.16 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 19 | 0.16 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 19 | 0.16 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 19 | 0.16 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 11 | 0.16 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 11 | 0.16 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 11 | 0.16 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 12 | 0.16 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 12 | 0.16 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 12 | 0.16 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 15 | 0.16 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 15 | 0.16 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 15 | 0.16 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 18 | 0.16 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 18 | 0.16 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 18 | 0.16 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 20 | 0.16 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 20 | 0.16 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 20 | 0.16 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 16 | 0.16 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 16 | 0.16 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 16 | 0.16 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE2 | 8 | 0.16 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE1 | 8 | 0.16 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE3 | 8 | 0.16 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE2 | 8 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE1 | 8 | 0.16 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE3 | 8 | 0.16 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE2 | 8 | 0.16 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE1 | 8 | 0.16 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE3 | 8 | 0.16 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 4 | 0.16 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 4 | 0.16 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 4 | 0.16 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 11 | 0.16 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 11 | 0.16 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 11 | 0.16 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 13 | 0.16 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 13 | 0.16 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 13 | 0.16 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 14 | 0.16 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 14 | 0.16 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 14 | 0.16 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG22 | 15 | 0.16 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG21 | 15 | 0.16 |
| (1,1160) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:9:VAL:HG23 | 15 | 0.16 |
| (1,116) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HB3 | 4 | 0.16 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 2 | 0.16 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 2 | 0.16 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 2 | 0.16 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 6 | 0.16 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 6 | 0.16 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 6 | 0.16 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 10 | 0.16 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 10 | 0.16 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 10 | 0.16 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 13 | 0.16 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 13 | 0.16 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 13 | 0.16 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 2 | 0.16 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 2 | 0.16 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 2 | 0.16 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 19 | 0.16 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 19 | 0.16 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 19 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:36:ILE:H | 15 | 0.16 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:36:ILE:H | 15 | 0.16 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:36:ILE:H | 15 | 0.16 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:72:ASN:HD21 | 4 | 0.16 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:72:ASN:HD21 | 4 | 0.16 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:72:ASN:HD21 | 4 | 0.16 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:72:ASN:HD21 | 17 | 0.16 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:72:ASN:HD21 | 17 | 0.16 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:72:ASN:HD21 | 17 | 0.16 |
| (1,104) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HA | 15 | 0.16 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 20 | 0.16 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 20 | 0.16 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 20 | 0.16 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 7 | 0.16 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 10 | 0.16 |
| (1,1019) | 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:105:PHE:H | 4 | 0.16 |
| (1,1019) | 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:105:PHE:H | 6 | 0.16 |
| (1,1001) | 1:A:20:LYS:HD3 | 1:A:20:LYS:HA | 1 | 0.16 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG22 | 9 | 0.15 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG21 | 9 | 0.15 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG23 | 9 | 0.15 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG22 | 9 | 0.15 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG21 | 9 | 0.15 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG23 | 9 | 0.15 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 1 | 0.15 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 1 | 0.15 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 2 | 0.15 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 2 | 0.15 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 19 | 0.15 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 19 | 0.15 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 20 | 0.15 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 20 | 0.15 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 2 | 0.15 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 2 | 0.15 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 2 | 0.15 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 7 | 0.15 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 7 | 0.15 |
| (2,70) | 1:A:102:TYR:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 7 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 1 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 1 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 1 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 1 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|-------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 1 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 1 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 1 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 1 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 1 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 1 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 1 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 1 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 6 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 6 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 6 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 11 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 11 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 11 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 11 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 11 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 11 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 11 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 11 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 11 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 11 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 11 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 11 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 19 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 19 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 19 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 19 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 19 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 19 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 19 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 19 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 19 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 19 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 19 | 0.15 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 19 | 0.15 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 6 | 0.15 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 6 | 0.15 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 6 | 0.15 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 6 | 0.15 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 6 | 0.15 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 6 | 0.15 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 13 | 0.15 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 13 | 0.15 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 13 | 0.15 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 13 | 0.15 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 13 | 0.15 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 13 | 0.15 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 19 | 0.15 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 19 | 0.15 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 19 | 0.15 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 19 | 0.15 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 19 | 0.15 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 19 | 0.15 |
| (2,551) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:20:LYS:HG3 | 14 | 0.15 |
| (2,551) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:56:ARG:HG3 | 14 | 0.15 |
| (2,551) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:56:ARG:HG2 | 14 | 0.15 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 10 | 0.15 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 10 | 0.15 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 10 | 0.15 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 10 | 0.15 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 11 | 0.15 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 11 | 0.15 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 11 | 0.15 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 11 | 0.15 |
| (2,535) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HA | 9 | 0.15 |
| (2,535) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HB | 9 | 0.15 |
| (2,535) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HA | 16 | 0.15 |
| (2,535) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HB | 16 | 0.15 |
| (2,535) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:15:LYS:HA | 18 | 0.15 |
| (2,535) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HB | 18 | 0.15 |
| (2,50) | 1:A:108:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG22 | 9 | 0.15 |
| (2,50) | 1:A:108:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG21 | 9 | 0.15 |
| (2,50) | 1:A:108:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG23 | 9 | 0.15 |
| (2,50) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:59:LEU:HD22 | 9 | 0.15 |
| (2,50) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:59:LEU:HD21 | 9 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,50) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:59:LEU:HD23 | 9 | 0.15 |
| (2,50) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:111:ILE:HG22 | 9 | 0.15 |
| (2,50) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:111:ILE:HG21 | 9 | 0.15 |
| (2,50) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:111:ILE:HG23 | 9 | 0.15 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:92:CYS:HB2 | 14 | 0.15 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:91:ASN:HB2 | 14 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 3 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 3 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 3 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 3 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 3 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 3 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 8 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 8 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 8 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 8 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 8 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 8 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 9 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 9 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 9 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 9 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 9 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 9 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 11 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 11 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 11 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 11 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 11 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 11 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 17 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 17 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 17 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 17 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 17 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 17 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 18 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 18 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 18 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 18 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 18 | 0.15 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 18 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 11 | 0.15 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 11 | 0.15 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 11 | 0.15 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD12 | 11 | 0.15 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD11 | 11 | 0.15 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD13 | 11 | 0.15 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB2 | 15 | 0.15 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB3 | 15 | 0.15 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG3 | 6 | 0.15 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 6 | 0.15 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG3 | 7 | 0.15 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 7 | 0.15 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG3 | 18 | 0.15 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 18 | 0.15 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HA | 15 | 0.15 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:18:THR:HB | 15 | 0.15 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 13 | 0.15 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 13 | 0.15 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 13 | 0.15 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB2 | 13 | 0.15 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB1 | 13 | 0.15 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB3 | 13 | 0.15 |
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG2 | 2 | 0.15 |
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG3 | 2 | 0.15 |
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG2 | 15 | 0.15 |
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG3 | 15 | 0.15 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB3 | 7 | 0.15 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB3 | 7 | 0.15 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB3 | 7 | 0.15 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB2 | 7 | 0.15 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB2 | 7 | 0.15 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB2 | 7 | 0.15 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB3 | 16 | 0.15 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB3 | 16 | 0.15 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB3 | 16 | 0.15 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB2 | 16 | 0.15 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB2 | 16 | 0.15 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB2 | 16 | 0.15 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB3 | 17 | 0.15 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB3 | 17 | 0.15 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB3 | 17 | 0.15 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB2 | 17 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB2 | 17 | 0.15 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB2 | 17 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 5 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 5 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 5 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 5 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 5 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 5 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 5 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 5 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 5 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 9 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 9 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 9 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 9 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 9 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 9 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 9 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 9 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 9 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 14 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 14 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 14 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 14 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 14 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 14 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 14 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 14 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 14 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 16 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 16 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 16 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 16 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 16 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 16 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 16 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 16 | 0.15 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 16 | 0.15 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:100:THR:HB | 2 | 0.15 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:100:THR:HB | 2 | 0.15 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:100:THR:HB | 2 | 0.15 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:65:ASP:HA | 2 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:65:ASP:HA | 2 | 0.15 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:65:ASP:HA | 2 | 0.15 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:92:CYS:HB3 | 16 | 0.15 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:92:CYS:HB3 | 16 | 0.15 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:92:CYS:HB3 | 16 | 0.15 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HB2 | 16 | 0.15 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HB2 | 16 | 0.15 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HB2 | 16 | 0.15 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 4 | 0.15 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 4 | 0.15 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 4 | 0.15 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 4 | 0.15 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 4 | 0.15 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 4 | 0.15 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 13 | 0.15 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 13 | 0.15 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 13 | 0.15 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 13 | 0.15 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 13 | 0.15 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 13 | 0.15 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:33:VAL:HB | 2 | 0.15 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:33:VAL:HB | 2 | 0.15 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:33:VAL:HB | 2 | 0.15 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:118:VAL:HB | 2 | 0.15 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:118:VAL:HB | 2 | 0.15 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:118:VAL:HB | 2 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 6 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 6 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 6 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 6 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 6 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 6 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 10 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 10 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 10 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 10 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 10 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 10 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 11 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 11 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 11 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 11 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 11 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 11 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 12 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 12 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 12 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 12 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 12 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 12 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 16 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 16 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 16 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 16 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 16 | 0.15 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 16 | 0.15 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:85:PHE:HE1 | 7 | 0.15 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:85:PHE:HE1 | 7 | 0.15 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:85:PHE:HE1 | 7 | 0.15 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG22 | 7 | 0.15 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG21 | 7 | 0.15 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG23 | 7 | 0.15 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:85:PHE:HE1 | 8 | 0.15 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:85:PHE:HE1 | 8 | 0.15 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:85:PHE:HE1 | 8 | 0.15 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG22 | 8 | 0.15 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG21 | 8 | 0.15 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG23 | 8 | 0.15 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:85:PHE:HE1 | 12 | 0.15 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:85:PHE:HE1 | 12 | 0.15 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:85:PHE:HE1 | 12 | 0.15 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG22 | 12 | 0.15 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG21 | 12 | 0.15 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG23 | 12 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 3 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 3 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 3 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 3 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 3 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 3 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 6 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 6 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 6 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 6 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 6 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 6 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 10 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 10 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 10 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 10 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 10 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 10 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 13 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 13 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 13 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 13 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 13 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 13 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 15 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 15 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 15 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 15 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 15 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 15 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 16 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 16 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 16 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 16 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 16 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 16 | 0.15 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HB3 | 1 | 0.15 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HB3 | 1 | 0.15 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HB3 | 1 | 0.15 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HG3 | 1 | 0.15 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HG3 | 1 | 0.15 |
| (2,321) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HG3 | 1 | 0.15 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:26:CYS:H | 16 | 0.15 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:26:CYS:H | 16 | 0.15 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:26:CYS:H | 16 | 0.15 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:33:VAL:H | 16 | 0.15 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:33:VAL:H | 16 | 0.15 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:33:VAL:H | 16 | 0.15 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 14 | 0.15 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 14 | 0.15 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 14 | 0.15 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:119:LYS:H | 14 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:119:LYS:H | 14 | 0.15 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:119:LYS:H | 14 | 0.15 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 18 | 0.15 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 18 | 0.15 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 18 | 0.15 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:119:LYS:H | 18 | 0.15 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:119:LYS:H | 18 | 0.15 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:119:LYS:H | 18 | 0.15 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:4:LYS:HA | 11 | 0.15 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:4:LYS:HA | 11 | 0.15 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:4:LYS:HA | 14 | 0.15 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:4:LYS:HA | 14 | 0.15 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:4:LYS:HA | 16 | 0.15 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:4:LYS:HA | 16 | 0.15 |
| (2,260) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:87:ILE:HA | 10 | 0.15 |
| (2,260) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HA | 10 | 0.15 |
| (2,252) | 1:A:19:ASN:HB3 | 1:A:20:LYS:HB2 | 1 | 0.15 |
| (2,252) | 1:A:19:ASN:HB3 | 1:A:20:LYS:HB3 | 1 | 0.15 |
| (2,252) | 1:A:19:ASN:HB3 | 1:A:20:LYS:HB2 | 8 | 0.15 |
| (2,252) | 1:A:19:ASN:HB3 | 1:A:20:LYS:HB3 | 8 | 0.15 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 6 | 0.15 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 6 | 0.15 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 10 | 0.15 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 10 | 0.15 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 15 | 0.15 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 15 | 0.15 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 18 | 0.15 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 18 | 0.15 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 7 | 0.15 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 7 | 0.15 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 7 | 0.15 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 7 | 0.15 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 3 | 0.15 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 3 | 0.15 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 3 | 0.15 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 3 | 0.15 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 3 | 0.15 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 3 | 0.15 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 17 | 0.15 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 17 | 0.15 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 17 | 0.15 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 17 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 17 | 0.15 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 17 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD22 | 5 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD21 | 5 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD23 | 5 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 5 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 5 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 5 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 5 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 5 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 5 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD22 | 8 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD21 | 8 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD23 | 8 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 8 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 8 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 8 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 8 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 8 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 8 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD22 | 16 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD21 | 16 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD23 | 16 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 16 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 16 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 16 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 16 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 16 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 16 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD22 | 18 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD21 | 18 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD23 | 18 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 18 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 18 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 18 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 18 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 18 | 0.15 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 18 | 0.15 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG3 | 12 | 0.15 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG2 | 12 | 0.15 |
| (2,170) | 1:A:58:CYS:HA | 1:A:20:LYS:HB2 | 13 | 0.15 |
| (2,170) | 1:A:58:CYS:HA | 1:A:20:LYS:HB3 | 13 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:21:LEU:HB3 | 7 | 0.15 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:45:LYS:HD3 | 7 | 0.15 |
| (2,157) | 1:A:42:VAL:HA | 1:A:46:ILE:HG13 | 7 | 0.15 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:113:ASN:HA | 15 | 0.15 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:117:ASP:HA | 15 | 0.15 |
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 9 | 0.15 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 9 | 0.15 |
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 19 | 0.15 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 19 | 0.15 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:101:ILE:HB | 17 | 0.15 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:56:ARG:HB3 | 17 | 0.15 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:101:ILE:HB | 17 | 0.15 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:101:ILE:HB | 20 | 0.15 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:56:ARG:HB3 | 20 | 0.15 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:101:ILE:HB | 20 | 0.15 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HE1 | 9 | 0.15 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HE1 | 9 | 0.15 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD22 | 7 | 0.15 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD21 | 7 | 0.15 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD23 | 7 | 0.15 |
| (1,952) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HG12 | 12 | 0.15 |
| (1,949) | 1:A:87:ILE:HG12 | 1:A:73:MET:HA | 16 | 0.15 |
| (1,933) | 1:A:121:ARG:HB2 | 1:A:121:ARG:HD2 | 5 | 0.15 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 4 | 0.15 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 5 | 0.15 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 14 | 0.15 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 1 | 0.15 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 4 | 0.15 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 16 | 0.15 |
| (1,836) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 7 | 0.15 |
| (1,836) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 12 | 0.15 |
| (1,813) | 1:A:88:GLU:HG2 | 1:A:73:MET:HA | 12 | 0.15 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD22 | 4 | 0.15 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD21 | 4 | 0.15 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD23 | 4 | 0.15 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD22 | 9 | 0.15 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD21 | 9 | 0.15 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD23 | 9 | 0.15 |
| (1,740) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:19:ASN:HB3 | 20 | 0.15 |
| (1,728) | 1:A:136:ASN:HB3 | 1:A:136:ASN:HA | 9 | 0.15 |
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 3 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 14 | 0.15 |
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 15 | 0.15 |
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 18 | 0.15 |
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 20 | 0.15 |
| (1,694) | 1:A:87:ILE:HB | 1:A:73:MET:HB3 | 4 | 0.15 |
| (1,678) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 6 | 0.15 |
| (1,678) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 13 | 0.15 |
| (1,678) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 15 | 0.15 |
| (1,678) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 19 | 0.15 |
| (1,63) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:109:VAL:HA | 2 | 0.15 |
| (1,63) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:109:VAL:HA | 6 | 0.15 |
| (1,63) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:109:VAL:HA | 8 | 0.15 |
| (1,63) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:109:VAL:HA | 20 | 0.15 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 3 | 0.15 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 3 | 0.15 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 3 | 0.15 |
| (1,597) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:83:VAL:H | 12 | 0.15 |
| (1,585) | 1:A:126:ALA:H | 1:A:125:ASN:HA | 13 | 0.15 |
| (1,570) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:137:ASP:H | 12 | 0.15 |
| (1,554) | 1:A:147:HIS:HA | 1:A:147:HIS:HD2 | 10 | 0.15 |
| (1,554) | 1:A:147:HIS:HA | 1:A:147:HIS:HD2 | 11 | 0.15 |
| (1,552) | 1:A:137:ASP:HA | 1:A:138:ILE:HA | 2 | 0.15 |
| (1,552) | 1:A:137:ASP:HA | 1:A:138:ILE:HA | 17 | 0.15 |
| (1,52) | 1:A:52:PHE:HD2 | 1:A:53:ASP:HB2 | 9 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 4 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 6 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 18 | 0.15 |
| (1,50) | 1:A:146:TRP:HB2 | 1:A:146:TRP:HD1 | 16 | 0.15 |
| (1,475) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:35:GLU:HA | 10 | 0.15 |
| (1,454) | 1:A:57:GLU:HA | 1:A:57:GLU:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,438) | 1:A:47:LYS:HA | 1:A:44:ARG:HA | 16 | 0.15 |
| (1,355) | 1:A:110:SER:HB3 | 1:A:111:ILE:HG12 | 5 | 0.15 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 6 | 0.15 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 7 | 0.15 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 14 | 0.15 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 14 | 0.15 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 14 | 0.15 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 14 | 0.15 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 17 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 17 | 0.15 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 17 | 0.15 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG21 | 17 | 0.15 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG22 | 17 | 0.15 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG23 | 17 | 0.15 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG21 | 17 | 0.15 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG22 | 17 | 0.15 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG23 | 17 | 0.15 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG21 | 17 | 0.15 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG22 | 17 | 0.15 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG23 | 17 | 0.15 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG21 | 18 | 0.15 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG22 | 18 | 0.15 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG23 | 18 | 0.15 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG21 | 18 | 0.15 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG22 | 18 | 0.15 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG23 | 18 | 0.15 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG21 | 18 | 0.15 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG22 | 18 | 0.15 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG23 | 18 | 0.15 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 3 | 0.15 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 18 | 0.15 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.15 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.15 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.15 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.15 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.15 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.15 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 2 | 0.15 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 2 | 0.15 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 2 | 0.15 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 19 | 0.15 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 19 | 0.15 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 19 | 0.15 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 19 | 0.15 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 19 | 0.15 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 19 | 0.15 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 19 | 0.15 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 19 | 0.15 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 19 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 18 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 18 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 18 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 18 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 18 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 18 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 18 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 18 | 0.15 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 18 | 0.15 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 3 | 0.15 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 10 | 0.15 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 15 | 0.15 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 17 | 0.15 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 18 | 0.15 |
| (1,2223) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:81:LYS:HG3 | 5 | 0.15 |
| (1,2223) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:81:LYS:HG3 | 19 | 0.15 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 15 | 0.15 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 4 | 0.15 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 4 | 0.15 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 4 | 0.15 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 20 | 0.15 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 20 | 0.15 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 20 | 0.15 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 1 | 0.15 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 1 | 0.15 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 1 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 13 | 0.15 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 13 | 0.15 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 13 | 0.15 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 19 | 0.15 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 19 | 0.15 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 19 | 0.15 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 20 | 0.15 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 20 | 0.15 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 20 | 0.15 |
| (1,2174) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:35:GLU:HG3 | 20 | 0.15 |
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 6 | 0.15 |
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 18 | 0.15 |
| (1,216) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HG2 | 14 | 0.15 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 1 | 0.15 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 5 | 0.15 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 11 | 0.15 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 14 | 0.15 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 15 | 0.15 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 16 | 0.15 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 19 | 0.15 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 20 | 0.15 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 4 | 0.15 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 4 | 0.15 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 4 | 0.15 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 7 | 0.15 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 7 | 0.15 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 7 | 0.15 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 14 | 0.15 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 14 | 0.15 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 14 | 0.15 |
| (1,2092) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG3 | 7 | 0.15 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 9 | 0.15 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 9 | 0.15 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 17 | 0.15 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 17 | 0.15 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,2059) | 1:A:136:ASN:HD21 | 1:A:137:ASP:H | 2 | 0.15 |
| (1,2059) | 1:A:136:ASN:HD21 | 1:A:137:ASP:H | 5 | 0.15 |
| (1,2043) | 1:A:90:THR:H | 1:A:89:ASN:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 5 | 0.15 |
| (1,2015) | 1:A:104:ASN:HD22 | 1:A:100:THR:HG21 | 15 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2015) | 1:A:104:ASN:HD22 | 1:A:100:THR:HG22 | 15 | 0.15 |
| (1,2015) | 1:A:104:ASN:HD22 | 1:A:100:THR:HG23 | 15 | 0.15 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG22 | 3 | 0.15 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG21 | 3 | 0.15 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG23 | 3 | 0.15 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD22 | 17 | 0.15 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD21 | 17 | 0.15 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD23 | 17 | 0.15 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 6 | 0.15 |
| (1,1924) | 1:A:85:PHE:H | 1:A:84:ASN:HB3 | 18 | 0.15 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 6 | 0.15 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 14 | 0.15 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 20 | 0.15 |
| (1,1864) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HG2 | 9 | 0.15 |
| (1,1854) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HG | 10 | 0.15 |
| (1,1850) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 15 | 0.15 |
| (1,1850) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 16 | 0.15 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 11 | 0.15 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 14 | 0.15 |
| (1,1797) | 1:A:81:LYS:H | 1:A:79:ASN:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 1 | 0.15 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 1 | 0.15 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 1 | 0.15 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 15 | 0.15 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 15 | 0.15 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 15 | 0.15 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 17 | 0.15 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 17 | 0.15 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 17 | 0.15 |
| (1,1746) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:109:VAL:HB | 1 | 0.15 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 14 | 0.15 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 15 | 0.15 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 18 | 0.15 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 3 | 0.15 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 3 | 0.15 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 3 | 0.15 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 12 | 0.15 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 13 | 0.15 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 13 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 13 | 0.15 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 18 | 0.15 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 18 | 0.15 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 18 | 0.15 |
| (1,1685) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:53:ASP:HB2 | 10 | 0.15 |
| (1,1685) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:53:ASP:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 4 | 0.15 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 17 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG3 | 7 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG3 | 11 | 0.15 |
| (1,1643) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG3 | 18 | 0.15 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 3 | 0.15 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 4 | 0.15 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 7 | 0.15 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 13 | 0.15 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 20 | 0.15 |
| (1,1563) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:9:VAL:HB | 15 | 0.15 |
| (1,1532) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 5 | 0.15 |
| (1,1532) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 4 | 0.15 |
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 5 | 0.15 |
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 6 | 0.15 |
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 11 | 0.15 |
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 19 | 0.15 |
| (1,1420) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:144:ILE:HB | 9 | 0.15 |
| (1,1418) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:146:TRP:H | 18 | 0.15 |
| (1,141) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:66:PHE:HD1 | 5 | 0.15 |
| (1,141) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:66:PHE:HD1 | 8 | 0.15 |
| (1,141) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:66:PHE:HD1 | 17 | 0.15 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:123:PHE:H | 13 | 0.15 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:123:PHE:H | 13 | 0.15 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:123:PHE:H | 13 | 0.15 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:123:PHE:H | 17 | 0.15 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:123:PHE:H | 17 | 0.15 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:123:PHE:H | 17 | 0.15 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HA | 5 | 0.15 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HA | 5 | 0.15 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HA | 5 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HA | 18 | 0.15 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HA | 18 | 0.15 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HA | 18 | 0.15 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:123:PHE:HD2 | 5 | 0.15 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:123:PHE:HD2 | 5 | 0.15 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:123:PHE:HD2 | 5 | 0.15 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 19 | 0.15 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 19 | 0.15 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 19 | 0.15 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG21 | 20 | 0.15 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG22 | 20 | 0.15 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG23 | 20 | 0.15 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:LYS:HA | 3 | 0.15 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:47:LYS:HA | 3 | 0.15 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:47:LYS:HA | 3 | 0.15 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:LYS:HA | 10 | 0.15 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:47:LYS:HA | 10 | 0.15 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:47:LYS:HA | 10 | 0.15 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:LYS:HA | 18 | 0.15 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:47:LYS:HA | 18 | 0.15 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:47:LYS:HA | 18 | 0.15 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 10 | 0.15 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 10 | 0.15 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 10 | 0.15 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 11 | 0.15 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 11 | 0.15 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 11 | 0.15 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 16 | 0.15 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 16 | 0.15 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 16 | 0.15 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 19 | 0.15 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 19 | 0.15 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 19 | 0.15 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 20 | 0.15 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 20 | 0.15 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 20 | 0.15 |
| (1,1282) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:87:ILE:HD12 | 16 | 0.15 |
| (1,1282) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:87:ILE:HD11 | 16 | 0.15 |
| (1,1282) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:87:ILE:HD13 | 16 | 0.15 |
| (1,1279) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HD12 | 4 | 0.15 |
| (1,1279) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HD11 | 4 | 0.15 |
| (1,1279) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HD13 | 4 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD12 | 9 | 0.15 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD11 | 9 | 0.15 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD13 | 9 | 0.15 |
| (1,1255) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HB | 9 | 0.15 |
| (1,1255) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HB | 9 | 0.15 |
| (1,1255) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HB | 9 | 0.15 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HA | 11 | 0.15 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HA | 11 | 0.15 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HA | 11 | 0.15 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HA | 14 | 0.15 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HA | 14 | 0.15 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HA | 14 | 0.15 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HA | 17 | 0.15 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HA | 17 | 0.15 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HA | 17 | 0.15 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD12 | 1:A:138:ILE:HA | 19 | 0.15 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD11 | 1:A:138:ILE:HA | 19 | 0.15 |
| (1,1254) | 1:A:138:ILE:HD13 | 1:A:138:ILE:HA | 19 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 2 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 2 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 2 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 5 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 5 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 5 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 8 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 8 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 8 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 11 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 11 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 11 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 16 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 16 | 0.15 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 16 | 0.15 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 20 | 0.15 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 20 | 0.15 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 20 | 0.15 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 17 | 0.15 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 17 | 0.15 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 17 | 0.15 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 19 | 0.15 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 19 | 0.15 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 19 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 4 | 0.15 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 4 | 0.15 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 4 | 0.15 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 7 | 0.15 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 7 | 0.15 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 7 | 0.15 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 15 | 0.15 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 15 | 0.15 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 15 | 0.15 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 16 | 0.15 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 16 | 0.15 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 16 | 0.15 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 18 | 0.15 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 18 | 0.15 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 18 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 3 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 3 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 3 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 4 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 4 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 4 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 6 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 6 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 6 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 10 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 10 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 10 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 14 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 14 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 14 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 19 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 19 | 0.15 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 19 | 0.15 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 2 | 0.15 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 2 | 0.15 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 2 | 0.15 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 6 | 0.15 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 6 | 0.15 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 6 | 0.15 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 7 | 0.15 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 7 | 0.15 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 7 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 9 | 0.15 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 9 | 0.15 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 9 | 0.15 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 15 | 0.15 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 15 | 0.15 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 15 | 0.15 |
| (1,1196) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:102:TYR:HE2 | 19 | 0.15 |
| (1,1196) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:102:TYR:HE2 | 19 | 0.15 |
| (1,1196) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:102:TYR:HE2 | 19 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 3 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD11 | 3 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD13 | 3 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD12 | 3 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 3 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD13 | 3 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD12 | 3 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD11 | 3 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD13 | 3 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 10 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD11 | 10 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD13 | 10 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD12 | 10 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 10 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD13 | 10 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD12 | 10 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD11 | 10 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD13 | 10 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 16 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD11 | 16 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD13 | 16 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD12 | 16 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 16 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD13 | 16 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD12 | 16 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD11 | 16 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD13 | 16 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 20 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD11 | 20 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD13 | 20 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD12 | 20 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 20 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD13 | 20 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD12 | 20 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD11 | 20 | 0.15 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD13 | 20 | 0.15 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE2 | 3 | 0.15 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE1 | 3 | 0.15 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE3 | 3 | 0.15 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE2 | 3 | 0.15 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE1 | 3 | 0.15 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE3 | 3 | 0.15 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE2 | 3 | 0.15 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE1 | 3 | 0.15 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE3 | 3 | 0.15 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE2 | 16 | 0.15 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE1 | 16 | 0.15 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE3 | 16 | 0.15 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE2 | 16 | 0.15 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE1 | 16 | 0.15 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE3 | 16 | 0.15 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE2 | 16 | 0.15 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE1 | 16 | 0.15 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE3 | 16 | 0.15 |
| (1,116) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 1 | 0.15 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 1 | 0.15 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 1 | 0.15 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,1131) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:28:THR:HG21 | 2 | 0.15 |
| (1,1131) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:28:THR:HG22 | 2 | 0.15 |
| (1,1131) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:28:THR:HG23 | 2 | 0.15 |
| (1,113) | 1:A:108:PHE:HE1 | 1:A:82:VAL:HG12 | 1 | 0.15 |
| (1,113) | 1:A:108:PHE:HE1 | 1:A:82:VAL:HG11 | 1 | 0.15 |
| (1,113) | 1:A:108:PHE:HE1 | 1:A:82:VAL:HG13 | 1 | 0.15 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:121:ARG:HD2 | 5 | 0.15 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:121:ARG:HD2 | 5 | 0.15 |
| (1,1099) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:121:ARG:HD2 | 5 | 0.15 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:36:ILE:H | 1 | 0.15 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:36:ILE:H | 1 | 0.15 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:36:ILE:H | 1 | 0.15 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:36:ILE:H | 5 | 0.15 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:36:ILE:H | 5 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:36:ILE:H | 5 | 0.15 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:36:ILE:H | 6 | 0.15 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:36:ILE:H | 6 | 0.15 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:36:ILE:H | 6 | 0.15 |
| (1,1074) | 1:A:76:LYS:HG3 | 1:A:77:ILE:H | 19 | 0.15 |
| (1,1055) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 6 | 0.15 |
| (1,104) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HA | 3 | 0.15 |
| (1,104) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HA | 10 | 0.15 |
| (1,104) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HA | 12 | 0.15 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 8 | 0.15 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 8 | 0.15 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 8 | 0.15 |
| (1,1019) | 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:105:PHE:H | 19 | 0.15 |
| (1,1019) | 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:105:PHE:H | 20 | 0.15 |
| (1,1001) | 1:A:20:LYS:HD3 | 1:A:20:LYS:HA | 8 | 0.15 |
| (1,1001) | 1:A:20:LYS:HD3 | 1:A:20:LYS:HA | 13 | 0.15 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:52:PHE:HA | 2 | 0.14 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:53:ASP:HA | 2 | 0.14 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:52:PHE:HA | 8 | 0.14 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:53:ASP:HA | 8 | 0.14 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:52:PHE:HA | 17 | 0.14 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:53:ASP:HA | 17 | 0.14 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 2 | 0.14 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 2 | 0.14 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 3 | 0.14 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 3 | 0.14 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 6 | 0.14 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 6 | 0.14 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 7 | 0.14 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 7 | 0.14 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 12 | 0.14 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 12 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 3 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 3 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 4 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 4 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 6 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 6 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 8 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 8 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 9 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 9 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 11 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 11 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 12 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 12 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 13 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 13 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 15 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 15 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 16 | 0.14 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 16 | 0.14 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 11 | 0.14 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 11 | 0.14 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 12 | 0.14 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 12 | 0.14 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 14 | 0.14 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 14 | 0.14 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 14 | 0.14 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 14 | 0.14 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 14 | 0.14 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 14 | 0.14 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 14 | 0.14 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 14 | 0.14 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 14 | 0.14 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 14 | 0.14 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 14 | 0.14 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 14 | 0.14 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 14 | 0.14 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 14 | 0.14 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 5 | 0.14 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 5 | 0.14 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 5 | 0.14 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 5 | 0.14 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 5 | 0.14 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 5 | 0.14 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 10 | 0.14 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 10 | 0.14 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 10 | 0.14 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 10 | 0.14 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 10 | 0.14 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 10 | 0.14 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 16 | 0.14 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 16 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|------------------|----------|---------------|
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 16 | 0.14 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 16 | 0.14 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 16 | 0.14 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 16 | 0.14 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 15 | 0.14 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 15 | 0.14 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 15 | 0.14 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 15 | 0.14 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:92:CYS:HB2 | 11 | 0.14 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:91:ASN:HB2 | 11 | 0.14 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 14 | 0.14 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 14 | 0.14 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 14 | 0.14 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 14 | 0.14 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 14 | 0.14 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 14 | 0.14 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 19 | 0.14 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 19 | 0.14 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 19 | 0.14 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 19 | 0.14 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 19 | 0.14 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 19 | 0.14 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 5 | 0.14 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 5 | 0.14 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 5 | 0.14 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD12 | 5 | 0.14 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD11 | 5 | 0.14 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD13 | 5 | 0.14 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 14 | 0.14 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 14 | 0.14 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 14 | 0.14 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD12 | 14 | 0.14 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD11 | 14 | 0.14 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD13 | 14 | 0.14 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 16 | 0.14 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 16 | 0.14 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 16 | 0.14 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD12 | 16 | 0.14 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD11 | 16 | 0.14 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD13 | 16 | 0.14 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB2 | 9 | 0.14 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB3 | 9 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,470) | 1:A:121:ARG:H | 1:A:33:VAL:HG22 | 6 | 0.14 |
| (2,470) | 1:A:121:ARG:H | 1:A:33:VAL:HG21 | 6 | 0.14 |
| (2,470) | 1:A:121:ARG:H | 1:A:33:VAL:HG23 | 6 | 0.14 |
| (2,470) | 1:A:121:ARG:H | 1:A:118:VAL:HG22 | 6 | 0.14 |
| (2,470) | 1:A:121:ARG:H | 1:A:118:VAL:HG21 | 6 | 0.14 |
| (2,470) | 1:A:121:ARG:H | 1:A:118:VAL:HG23 | 6 | 0.14 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG3 | 10 | 0.14 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 10 | 0.14 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HG3 | 9 | 0.14 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 9 | 0.14 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 9 | 0.14 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 1 | 0.14 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 1 | 0.14 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 1 | 0.14 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB2 | 1 | 0.14 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB1 | 1 | 0.14 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB3 | 1 | 0.14 |
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG2 | 7 | 0.14 |
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG3 | 7 | 0.14 |
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG2 | 10 | 0.14 |
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG3 | 10 | 0.14 |
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG2 | 13 | 0.14 |
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG3 | 13 | 0.14 |
| (2,389) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:31:GLU:HB2 | 8 | 0.14 |
| (2,389) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HB | 8 | 0.14 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 7 | 0.14 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 7 | 0.14 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 7 | 0.14 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 7 | 0.14 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 7 | 0.14 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 7 | 0.14 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:61:TYR:HB2 | 9 | 0.14 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:61:TYR:HB2 | 9 | 0.14 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:61:TYR:HB2 | 9 | 0.14 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG22 | 1:A:102:TYR:HB2 | 9 | 0.14 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG21 | 1:A:102:TYR:HB2 | 9 | 0.14 |
| (2,354) | 1:A:101:ILE:HG23 | 1:A:102:TYR:HB2 | 9 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 2 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 2 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 2 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 2 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 2 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 2 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 2 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 2 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 2 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:35:GLU:HG3 | 13 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:35:GLU:HG3 | 13 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:35:GLU:HG3 | 13 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG2 | 13 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG2 | 13 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG2 | 13 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG22 | 1:A:16:GLN:HG3 | 13 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG21 | 1:A:16:GLN:HG3 | 13 | 0.14 |
| (2,351) | 1:A:111:ILE:HG23 | 1:A:16:GLN:HG3 | 13 | 0.14 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:92:CYS:HB3 | 3 | 0.14 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:92:CYS:HB3 | 3 | 0.14 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:92:CYS:HB3 | 3 | 0.14 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HB2 | 3 | 0.14 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HB2 | 3 | 0.14 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HB2 | 3 | 0.14 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:92:CYS:HB3 | 8 | 0.14 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:92:CYS:HB3 | 8 | 0.14 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:92:CYS:HB3 | 8 | 0.14 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HB2 | 8 | 0.14 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HB2 | 8 | 0.14 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HB2 | 8 | 0.14 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:33:VAL:HB | 20 | 0.14 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:33:VAL:HB | 20 | 0.14 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:33:VAL:HB | 20 | 0.14 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:118:VAL:HB | 20 | 0.14 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:118:VAL:HB | 20 | 0.14 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:118:VAL:HB | 20 | 0.14 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 4 | 0.14 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 4 | 0.14 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 4 | 0.14 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 4 | 0.14 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 4 | 0.14 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 4 | 0.14 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 13 | 0.14 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 13 | 0.14 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 13 | 0.14 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 13 | 0.14 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 13 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 13 | 0.14 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 15 | 0.14 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 15 | 0.14 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 15 | 0.14 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 15 | 0.14 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 15 | 0.14 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 15 | 0.14 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 9 | 0.14 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 9 | 0.14 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 9 | 0.14 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 9 | 0.14 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 9 | 0.14 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 9 | 0.14 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:85:PHE:HE1 | 18 | 0.14 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:85:PHE:HE1 | 18 | 0.14 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:85:PHE:HE1 | 18 | 0.14 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG22 | 18 | 0.14 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG21 | 18 | 0.14 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG23 | 18 | 0.14 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:85:PHE:HE1 | 19 | 0.14 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:85:PHE:HE1 | 19 | 0.14 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:85:PHE:HE1 | 19 | 0.14 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG22 | 19 | 0.14 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG21 | 19 | 0.14 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG23 | 19 | 0.14 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:85:PHE:HE1 | 20 | 0.14 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:85:PHE:HE1 | 20 | 0.14 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:85:PHE:HE1 | 20 | 0.14 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG22 | 20 | 0.14 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG21 | 20 | 0.14 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG23 | 20 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 5 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 5 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 5 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 5 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 5 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 5 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 9 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 9 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 9 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 9 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 9 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 9 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 12 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 12 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 12 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 12 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 12 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 12 | 0.14 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:26:CYS:H | 11 | 0.14 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:26:CYS:H | 11 | 0.14 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:26:CYS:H | 11 | 0.14 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:33:VAL:H | 11 | 0.14 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:33:VAL:H | 11 | 0.14 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:33:VAL:H | 11 | 0.14 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 2 | 0.14 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 2 | 0.14 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 2 | 0.14 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:119:LYS:H | 2 | 0.14 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:119:LYS:H | 2 | 0.14 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:119:LYS:H | 2 | 0.14 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 8 | 0.14 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 8 | 0.14 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 8 | 0.14 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:119:LYS:H | 8 | 0.14 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:119:LYS:H | 8 | 0.14 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:119:LYS:H | 8 | 0.14 |
| (2,296) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:120:LYS:HG2 | 15 | 0.14 |
| (2,296) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:126:ALA:HB2 | 15 | 0.14 |
| (2,296) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:126:ALA:HB1 | 15 | 0.14 |
| (2,296) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:126:ALA:HB3 | 15 | 0.14 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:4:LYS:HA | 1 | 0.14 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:4:LYS:HA | 1 | 0.14 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:4:LYS:HA | 5 | 0.14 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:4:LYS:HA | 5 | 0.14 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 12 | 0.14 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 12 | 0.14 |
| (2,252) | 1:A:19:ASN:HB3 | 1:A:20:LYS:HB2 | 2 | 0.14 |
| (2,252) | 1:A:19:ASN:HB3 | 1:A:20:LYS:HB3 | 2 | 0.14 |
| (2,252) | 1:A:19:ASN:HB3 | 1:A:20:LYS:HB2 | 17 | 0.14 |
| (2,252) | 1:A:19:ASN:HB3 | 1:A:20:LYS:HB3 | 17 | 0.14 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 7 | 0.14 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 7 | 0.14 |
| (2,244) | 1:A:95:ASN:HB3 | 1:A:93:LEU:HA | 7 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,244) | 1:A:95:ASN:HB3 | 1:A:97:SER:HB3 | 7 | 0.14 |
| (2,229) | 1:A:86:ASN:HD22 | 1:A:86:ASN:HB2 | 1 | 0.14 |
| (2,229) | 1:A:86:ASN:HD22 | 1:A:86:ASN:HB3 | 1 | 0.14 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 9 | 0.14 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 9 | 0.14 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 9 | 0.14 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 9 | 0.14 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 18 | 0.14 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 18 | 0.14 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 18 | 0.14 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 18 | 0.14 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 19 | 0.14 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 19 | 0.14 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 19 | 0.14 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 19 | 0.14 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HB3 | 2 | 0.14 |
| (2,214) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:124:GLU:HG3 | 2 | 0.14 |
| (2,211) | 1:A:94:ASN:HA | 1:A:93:LEU:HA | 3 | 0.14 |
| (2,211) | 1:A:94:ASN:HA | 1:A:99:GLU:HA | 3 | 0.14 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HD2 | 19 | 0.14 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 19 | 0.14 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 19 | 0.14 |
| (2,209) | 1:A:79:ASN:HA | 1:A:79:ASN:HB2 | 8 | 0.14 |
| (2,209) | 1:A:147:HIS:HA | 1:A:147:HIS:HB2 | 8 | 0.14 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 9 | 0.14 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 9 | 0.14 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 9 | 0.14 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 9 | 0.14 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 9 | 0.14 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 9 | 0.14 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 11 | 0.14 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 11 | 0.14 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 11 | 0.14 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 11 | 0.14 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 11 | 0.14 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 11 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD22 | 7 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD21 | 7 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD23 | 7 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 7 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 7 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 7 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 7 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 7 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 7 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 15 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 15 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 15 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 15 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 15 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 15 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD22 | 20 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD21 | 20 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD23 | 20 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 20 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 20 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 20 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 20 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 20 | 0.14 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 20 | 0.14 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG3 | 11 | 0.14 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG2 | 11 | 0.14 |
| (2,170) | 1:A:58:CYS:HA | 1:A:20:LYS:HB2 | 19 | 0.14 |
| (2,170) | 1:A:58:CYS:HA | 1:A:20:LYS:HB3 | 19 | 0.14 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:113:ASN:HA | 1 | 0.14 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:117:ASP:HA | 1 | 0.14 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:113:ASN:HA | 11 | 0.14 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:117:ASP:HA | 11 | 0.14 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:113:ASN:HA | 13 | 0.14 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:117:ASP:HA | 13 | 0.14 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:113:ASN:HA | 17 | 0.14 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:117:ASP:HA | 17 | 0.14 |
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 6 | 0.14 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 6 | 0.14 |
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 7 | 0.14 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 7 | 0.14 |
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 11 | 0.14 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 11 | 0.14 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:135:LEU:HD22 | 16 | 0.14 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:135:LEU:HD21 | 16 | 0.14 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:135:LEU:HD23 | 16 | 0.14 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:135:LEU:HD22 | 16 | 0.14 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:135:LEU:HD21 | 16 | 0.14 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:135:LEU:HD23 | 16 | 0.14 |
| (2,124) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HB | 1 | 0.14 |
| (2,124) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HB | 1 | 0.14 |
| (2,124) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HB | 4 | 0.14 |
| (2,124) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HB | 4 | 0.14 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:101:ILE:HB | 2 | 0.14 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:56:ARG:HB3 | 2 | 0.14 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:101:ILE:HB | 2 | 0.14 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:101:ILE:HB | 5 | 0.14 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:56:ARG:HB3 | 5 | 0.14 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:101:ILE:HB | 5 | 0.14 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:101:ILE:HB | 7 | 0.14 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:56:ARG:HB3 | 7 | 0.14 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:101:ILE:HB | 7 | 0.14 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:101:ILE:HB | 8 | 0.14 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:56:ARG:HB3 | 8 | 0.14 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:101:ILE:HB | 8 | 0.14 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:101:ILE:HB | 11 | 0.14 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:56:ARG:HB3 | 11 | 0.14 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:101:ILE:HB | 11 | 0.14 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HE1 | 13 | 0.14 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HE1 | 13 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,949) | 1:A:87:ILE:HG12 | 1:A:73:MET:HA | 3 | 0.14 |
| (1,949) | 1:A:87:ILE:HG12 | 1:A:73:MET:HA | 12 | 0.14 |
| (1,933) | 1:A:121:ARG:HB2 | 1:A:121:ARG:HD2 | 12 | 0.14 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 1 | 0.14 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 11 | 0.14 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 19 | 0.14 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 3 | 0.14 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 10 | 0.14 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 11 | 0.14 |
| (1,836) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 1 | 0.14 |
| (1,836) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 10 | 0.14 |
| (1,836) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 18 | 0.14 |
| (1,813) | 1:A:88:GLU:HG2 | 1:A:73:MET:HA | 5 | 0.14 |
| (1,813) | 1:A:88:GLU:HG2 | 1:A:73:MET:HA | 9 | 0.14 |
| (1,808) | 1:A:145:GLU:HG3 | 1:A:145:GLU:HA | 9 | 0.14 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG12 | 4 | 0.14 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG11 | 4 | 0.14 |
| (1,801) | 1:A:78:GLU:HG3 | 1:A:83:VAL:HG13 | 4 | 0.14 |
| (1,740) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:19:ASN:HB3 | 12 | 0.14 |
| (1,740) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:19:ASN:HB3 | 19 | 0.14 |
| (1,728) | 1:A:136:ASN:HB3 | 1:A:136:ASN:HA | 15 | 0.14 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 1 | 0.14 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 2 | 0.14 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 3 | 0.14 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 7 | 0.14 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 9 | 0.14 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 10 | 0.14 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 12 | 0.14 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 14 | 0.14 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 16 | 0.14 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 18 | 0.14 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 19 | 0.14 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 20 | 0.14 |
| (1,678) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 12 | 0.14 |
| (1,668) | 1:A:137:ASP:HB2 | 1:A:138:ILE:H | 1 | 0.14 |
| (1,668) | 1:A:137:ASP:HB2 | 1:A:138:ILE:H | 19 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:53:ASP:H | 7 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:53:ASP:H | 9 | 0.14 |
| (1,656) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:53:ASP:H | 13 | 0.14 |
| (1,63) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:109:VAL:HA | 3 | 0.14 |
| (1,63) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:109:VAL:HA | 15 | 0.14 |
| (1,63) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:109:VAL:HA | 17 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,63) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:109:VAL:HA | 18 | 0.14 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 5 | 0.14 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 5 | 0.14 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 5 | 0.14 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 10 | 0.14 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 10 | 0.14 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 10 | 0.14 |
| (1,597) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:83:VAL:H | 17 | 0.14 |
| (1,597) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:83:VAL:H | 20 | 0.14 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD12 | 9 | 0.14 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD11 | 9 | 0.14 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD13 | 9 | 0.14 |
| (1,570) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:137:ASP:H | 16 | 0.14 |
| (1,554) | 1:A:147:HIS:HA | 1:A:147:HIS:HD2 | 9 | 0.14 |
| (1,552) | 1:A:137:ASP:HA | 1:A:138:ILE:HA | 12 | 0.14 |
| (1,552) | 1:A:137:ASP:HA | 1:A:138:ILE:HA | 16 | 0.14 |
| (1,527) | 1:A:145:GLU:HA | 1:A:146:TRP:HB3 | 4 | 0.14 |
| (1,520) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HG2 | 6 | 0.14 |
| (1,52) | 1:A:52:PHE:HD2 | 1:A:53:ASP:HB2 | 5 | 0.14 |
| (1,52) | 1:A:52:PHE:HD2 | 1:A:53:ASP:HB2 | 19 | 0.14 |
| (1,505) | 1:A:124:GLU:HA | 1:A:124:GLU:H | 3 | 0.14 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 3 | 0.14 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 8 | 0.14 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 16 | 0.14 |
| (1,475) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:35:GLU:HA | 1 | 0.14 |
| (1,475) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:35:GLU:HA | 16 | 0.14 |
| (1,475) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:35:GLU:HA | 17 | 0.14 |
| (1,454) | 1:A:57:GLU:HA | 1:A:57:GLU:HB2 | 7 | 0.14 |
| (1,454) | 1:A:57:GLU:HA | 1:A:57:GLU:HB2 | 20 | 0.14 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 9 | 0.14 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 9 | 0.14 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 9 | 0.14 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 10 | 0.14 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 10 | 0.14 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 10 | 0.14 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,438) | 1:A:47:LYS:HA | 1:A:44:ARG:HA | 18 | 0.14 |
| (1,415) | 1:A:97:SER:HA | 1:A:96:PRO:HB2 | 3 | 0.14 |
| (1,41) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HA | 10 | 0.14 |
| (1,387) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:65:ASP:HB3 | 11 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,387) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:65:ASP:HB3 | 16 | 0.14 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 2 | 0.14 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 3 | 0.14 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 7 | 0.14 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 11 | 0.14 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 14 | 0.14 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 15 | 0.14 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 20 | 0.14 |
| (1,355) | 1:A:110:SER:HB3 | 1:A:111:ILE:HG12 | 4 | 0.14 |
| (1,354) | 1:A:11:SER:HB3 | 1:A:11:SER:HA | 5 | 0.14 |
| (1,31) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:43:LYS:HG2 | 2 | 0.14 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 20 | 0.14 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 20 | 0.14 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 20 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG21 | 3 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG22 | 3 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG23 | 3 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG21 | 3 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG22 | 3 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG23 | 3 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG21 | 3 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG22 | 3 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG23 | 3 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG21 | 4 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG22 | 4 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG23 | 4 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG21 | 4 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG22 | 4 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG23 | 4 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG21 | 4 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG22 | 4 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG23 | 4 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG21 | 12 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG22 | 12 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG23 | 12 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG21 | 12 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG22 | 12 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG23 | 12 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG21 | 12 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG22 | 12 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG23 | 12 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG21 | 19 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG22 | 19 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG23 | 19 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG21 | 19 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG22 | 19 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG23 | 19 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG21 | 19 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG22 | 19 | 0.14 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG23 | 19 | 0.14 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 7 | 0.14 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 19 | 0.14 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE2 | 6 | 0.14 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE1 | 6 | 0.14 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE3 | 6 | 0.14 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE2 | 6 | 0.14 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE1 | 6 | 0.14 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE3 | 6 | 0.14 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE2 | 6 | 0.14 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE1 | 6 | 0.14 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE3 | 6 | 0.14 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE2 | 10 | 0.14 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE1 | 10 | 0.14 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE3 | 10 | 0.14 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE2 | 10 | 0.14 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE1 | 10 | 0.14 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE3 | 10 | 0.14 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE2 | 10 | 0.14 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE1 | 10 | 0.14 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE3 | 10 | 0.14 |
| (1,232) | 1:A:123:PHE:HD1 | 1:A:47:LYS:HG2 | 20 | 0.14 |
| (1,23) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:82:VAL:HG12 | 9 | 0.14 |
| (1,23) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:82:VAL:HG11 | 9 | 0.14 |
| (1,23) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:82:VAL:HG13 | 9 | 0.14 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.14 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.14 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.14 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.14 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.14 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.14 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 10 | 0.14 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 10 | 0.14 |
| (1,2293) | 1:A:115:VAL:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 10 | 0.14 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.14 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.14 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.14 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.14 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.14 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.14 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.14 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.14 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 19 | 0.14 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 19 | 0.14 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 19 | 0.14 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 19 | 0.14 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 19 | 0.14 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 19 | 0.14 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 19 | 0.14 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 19 | 0.14 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 19 | 0.14 |
| (1,2273) | 1:A:115:VAL:H | 1:A:116:THR:HB | 16 | 0.14 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 6 | 0.14 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 7 | 0.14 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 8 | 0.14 |
| (1,2241) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:73:MET:H | 16 | 0.14 |
| (1,2234) | 1:A:86:ASN:H | 1:A:73:MET:HB2 | 19 | 0.14 |
| (1,2223) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:81:LYS:HG3 | 6 | 0.14 |
| (1,2223) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:81:LYS:HG3 | 15 | 0.14 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 3 | 0.14 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 17 | 0.14 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 17 | 0.14 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 17 | 0.14 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 6 | 0.14 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 9 | 0.14 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 15 | 0.14 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 16 | 0.14 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 20 | 0.14 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 3 | 0.14 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 3 | 0.14 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 3 | 0.14 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 16 | 0.14 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 16 | 0.14 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 16 | 0.14 |
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 9 | 0.14 |
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 13 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 16 | 0.14 |
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 17 | 0.14 |
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 19 | 0.14 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 2 | 0.14 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 3 | 0.14 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 4 | 0.14 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 6 | 0.14 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 8 | 0.14 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 9 | 0.14 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 10 | 0.14 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 12 | 0.14 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 17 | 0.14 |
| (1,2157) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:H | 18 | 0.14 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 12 | 0.14 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 12 | 0.14 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 12 | 0.14 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 16 | 0.14 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 16 | 0.14 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 16 | 0.14 |
| (1,2138) | 1:A:28:THR:H | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.14 |
| (1,2092) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG3 | 1 | 0.14 |
| (1,2092) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG3 | 2 | 0.14 |
| (1,2092) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG3 | 19 | 0.14 |
| (1,2092) | 1:A:107:GLN:HE22 | 1:A:107:GLN:HG3 | 20 | 0.14 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 14 | 0.14 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 14 | 0.14 |
| (1,2071) | 1:A:10:GLY:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 14 | 0.14 |
| (1,2043) | 1:A:90:THR:H | 1:A:89:ASN:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 9 | 0.14 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 15 | 0.14 |
| (1,2015) | 1:A:104:ASN:HD22 | 1:A:100:THR:HG21 | 18 | 0.14 |
| (1,2015) | 1:A:104:ASN:HD22 | 1:A:100:THR:HG22 | 18 | 0.14 |
| (1,2015) | 1:A:104:ASN:HD22 | 1:A:100:THR:HG23 | 18 | 0.14 |
| (1,2010) | 1:A:24:ASN:HD22 | 1:A:24:ASN:H | 3 | 0.14 |
| (1,20) | 1:A:75:PHE:HB2 | 1:A:75:PHE:HD2 | 11 | 0.14 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG22 | 10 | 0.14 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG21 | 10 | 0.14 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG23 | 10 | 0.14 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG22 | 11 | 0.14 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG21 | 11 | 0.14 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG23 | 11 | 0.14 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG22 | 17 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG21 | 17 | 0.14 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG23 | 17 | 0.14 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG22 | 18 | 0.14 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG21 | 18 | 0.14 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG23 | 18 | 0.14 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD22 | 7 | 0.14 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD21 | 7 | 0.14 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD23 | 7 | 0.14 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 8 | 0.14 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 9 | 0.14 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 12 | 0.14 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 11 | 0.14 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 12 | 0.14 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 15 | 0.14 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 16 | 0.14 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 18 | 0.14 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 19 | 0.14 |
| (1,1904) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:38:LYS:HG2 | 2 | 0.14 |
| (1,1895) | 1:A:65:ASP:H | 1:A:62:PRO:HB3 | 20 | 0.14 |
| (1,1856) | 1:A:142:GLN:H | 1:A:141:ALA:HB2 | 13 | 0.14 |
| (1,1856) | 1:A:142:GLN:H | 1:A:141:ALA:HB1 | 13 | 0.14 |
| (1,1856) | 1:A:142:GLN:H | 1:A:141:ALA:HB3 | 13 | 0.14 |
| (1,1855) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HD12 | 11 | 0.14 |
| (1,1855) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HD11 | 11 | 0.14 |
| (1,1855) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HD13 | 11 | 0.14 |
| (1,1853) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:136:ASN:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,1850) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,1850) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 6 | 0.14 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 1 | 0.14 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 3 | 0.14 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 7 | 0.14 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 8 | 0.14 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 12 | 0.14 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 20 | 0.14 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 3 | 0.14 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 3 | 0.14 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 3 | 0.14 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 10 | 0.14 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 10 | 0.14 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 10 | 0.14 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 11 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 11 | 0.14 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 11 | 0.14 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 12 | 0.14 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 12 | 0.14 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 12 | 0.14 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 13 | 0.14 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 13 | 0.14 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 13 | 0.14 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 14 | 0.14 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 14 | 0.14 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 14 | 0.14 |
| (1,1767) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:93:LEU:HB2 | 8 | 0.14 |
| (1,1746) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:109:VAL:HB | 14 | 0.14 |
| (1,1746) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:109:VAL:HB | 17 | 0.14 |
| (1,1740) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HB3 | 12 | 0.14 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 12 | 0.14 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 7 | 0.14 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 7 | 0.14 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 7 | 0.14 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 10 | 0.14 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 10 | 0.14 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 10 | 0.14 |
| (1,1661) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 7 | 0.14 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 5 | 0.14 |
| (1,1643) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG3 | 12 | 0.14 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 16 | 0.14 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 19 | 0.14 |
| (1,1578) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:138:ILE:HG22 | 2 | 0.14 |
| (1,1578) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:138:ILE:HG21 | 2 | 0.14 |
| (1,1578) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:138:ILE:HG23 | 2 | 0.14 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 8 | 0.14 |
| (1,1566) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:95:ASN:HB2 | 15 | 0.14 |
| (1,1556) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:123:PHE:HB3 | 8 | 0.14 |
| (1,1550) | 1:A:147:HIS:H | 1:A:146:TRP:HB2 | 15 | 0.14 |
| (1,1542) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 10 | 0.14 |
| (1,1542) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 11 | 0.14 |
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 7 | 0.14 |
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 9 | 0.14 |
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 10 | 0.14 |
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 17 | 0.14 |
| (1,1455) | 1:A:141:ALA:H | 1:A:140:GLU:HB3 | 11 | 0.14 |
| (1,1420) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:144:ILE:HB | 16 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1420) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:144:ILE:HB | 17 | 0.14 |
| (1,1418) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:146:TRP:H | 6 | 0.14 |
| (1,1418) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:146:TRP:H | 8 | 0.14 |
| (1,141) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:66:PHE:HD1 | 2 | 0.14 |
| (1,141) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:66:PHE:HD1 | 13 | 0.14 |
| (1,1404) | 1:A:12:ALA:H | 1:A:11:SER:HA | 1 | 0.14 |
| (1,1404) | 1:A:12:ALA:H | 1:A:11:SER:HA | 3 | 0.14 |
| (1,1404) | 1:A:12:ALA:H | 1:A:11:SER:HA | 6 | 0.14 |
| (1,1404) | 1:A:12:ALA:H | 1:A:11:SER:HA | 13 | 0.14 |
| (1,1404) | 1:A:12:ALA:H | 1:A:11:SER:HA | 20 | 0.14 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:123:PHE:H | 3 | 0.14 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:123:PHE:H | 3 | 0.14 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:123:PHE:H | 3 | 0.14 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:123:PHE:H | 18 | 0.14 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:123:PHE:H | 18 | 0.14 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:123:PHE:H | 18 | 0.14 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:123:PHE:H | 19 | 0.14 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:123:PHE:H | 19 | 0.14 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:123:PHE:H | 19 | 0.14 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:123:PHE:H | 20 | 0.14 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:123:PHE:H | 20 | 0.14 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:123:PHE:H | 20 | 0.14 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HA | 10 | 0.14 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HA | 10 | 0.14 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HA | 10 | 0.14 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HA | 13 | 0.14 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HA | 13 | 0.14 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HA | 13 | 0.14 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HA | 14 | 0.14 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HA | 14 | 0.14 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HA | 14 | 0.14 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HA | 15 | 0.14 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HA | 15 | 0.14 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HA | 15 | 0.14 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:123:PHE:HD2 | 2 | 0.14 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:123:PHE:HD2 | 2 | 0.14 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:123:PHE:HD2 | 2 | 0.14 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:123:PHE:HD2 | 8 | 0.14 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:123:PHE:HD2 | 8 | 0.14 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:123:PHE:HD2 | 8 | 0.14 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG21 | 12 | 0.14 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG22 | 12 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG23 | 12 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:LYS:HA | 4 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:47:LYS:HA | 4 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:47:LYS:HA | 4 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:LYS:HA | 5 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:47:LYS:HA | 5 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:47:LYS:HA | 5 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:LYS:HA | 6 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:47:LYS:HA | 6 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:47:LYS:HA | 6 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:LYS:HA | 9 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:47:LYS:HA | 9 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:47:LYS:HA | 9 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:LYS:HA | 11 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:47:LYS:HA | 11 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:47:LYS:HA | 11 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:LYS:HA | 13 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:47:LYS:HA | 13 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:47:LYS:HA | 13 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:LYS:HA | 15 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:47:LYS:HA | 15 | 0.14 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:47:LYS:HA | 15 | 0.14 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:74:ARG:H | 14 | 0.14 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:74:ARG:H | 14 | 0.14 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:74:ARG:H | 14 | 0.14 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 1 | 0.14 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 1 | 0.14 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 1 | 0.14 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 2 | 0.14 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 2 | 0.14 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 2 | 0.14 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HD2 | 6 | 0.14 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HD2 | 6 | 0.14 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HD2 | 6 | 0.14 |
| (1,1270) | 1:A:69:LEU:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 3 | 0.14 |
| (1,1270) | 1:A:69:LEU:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 3 | 0.14 |
| (1,1270) | 1:A:69:LEU:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 3 | 0.14 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD12 | 11 | 0.14 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD11 | 11 | 0.14 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD13 | 11 | 0.14 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD12 | 16 | 0.14 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD11 | 16 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD13 | 16 | 0.14 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD12 | 17 | 0.14 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD11 | 17 | 0.14 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD13 | 17 | 0.14 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 2 | 0.14 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 2 | 0.14 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 2 | 0.14 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD12 | 6 | 0.14 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD11 | 6 | 0.14 |
| (1,1244) | 1:A:95:ASN:HD22 | 1:A:98:ILE:HD13 | 6 | 0.14 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 3 | 0.14 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 3 | 0.14 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 3 | 0.14 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 10 | 0.14 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 10 | 0.14 |
| (1,124) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 10 | 0.14 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 5 | 0.14 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 5 | 0.14 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 5 | 0.14 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 6 | 0.14 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 6 | 0.14 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 6 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 3 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 3 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 3 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 6 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 6 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 6 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 10 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 10 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 10 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 12 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 12 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 12 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 17 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 17 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 17 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 20 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 20 | 0.14 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 20 | 0.14 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 7 | 0.14 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 7 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 7 | 0.14 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 13 | 0.14 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 13 | 0.14 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 13 | 0.14 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 16 | 0.14 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 16 | 0.14 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 16 | 0.14 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 17 | 0.14 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 17 | 0.14 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 17 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE2 | 1 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE1 | 1 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE3 | 1 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE2 | 1 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE1 | 1 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE3 | 1 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE2 | 1 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE1 | 1 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE3 | 1 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE2 | 5 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE1 | 5 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE3 | 5 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE2 | 5 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE1 | 5 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE3 | 5 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE2 | 5 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE1 | 5 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE3 | 5 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE2 | 6 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE1 | 6 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE3 | 6 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE2 | 6 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE1 | 6 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE3 | 6 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE2 | 6 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE1 | 6 | 0.14 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE3 | 6 | 0.14 |
| (1,116) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HB3 | 19 | 0.14 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 11 | 0.14 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 11 | 0.14 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 11 | 0.14 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 12 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 12 | 0.14 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 12 | 0.14 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 16 | 0.14 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 16 | 0.14 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 16 | 0.14 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 18 | 0.14 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 18 | 0.14 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 18 | 0.14 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 19 | 0.14 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 19 | 0.14 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 19 | 0.14 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 20 | 0.14 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 20 | 0.14 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 20 | 0.14 |
| (1,114) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HA | 2 | 0.14 |
| (1,114) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HA | 3 | 0.14 |
| (1,114) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HA | 4 | 0.14 |
| (1,114) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HA | 10 | 0.14 |
| (1,114) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HA | 17 | 0.14 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD12 | 8 | 0.14 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD11 | 8 | 0.14 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD13 | 8 | 0.14 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD12 | 8 | 0.14 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD11 | 8 | 0.14 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD13 | 8 | 0.14 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD12 | 8 | 0.14 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD11 | 8 | 0.14 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD13 | 8 | 0.14 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG22 | 2 | 0.14 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG21 | 2 | 0.14 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG23 | 2 | 0.14 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG22 | 3 | 0.14 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG21 | 3 | 0.14 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG23 | 3 | 0.14 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:36:ILE:H | 2 | 0.14 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:36:ILE:H | 2 | 0.14 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:36:ILE:H | 2 | 0.14 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:36:ILE:H | 4 | 0.14 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:36:ILE:H | 4 | 0.14 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:36:ILE:H | 4 | 0.14 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:36:ILE:H | 13 | 0.14 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:36:ILE:H | 13 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:36:ILE:H | 13 | 0.14 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD12 | 1:A:32:LEU:HA | 3 | 0.14 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD11 | 1:A:32:LEU:HA | 3 | 0.14 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD13 | 1:A:32:LEU:HA | 3 | 0.14 |
| (1,1055) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 7 | 0.14 |
| (1,104) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HA | 4 | 0.14 |
| (1,104) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HA | 8 | 0.14 |
| (1,104) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HA | 20 | 0.14 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 10 | 0.14 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 10 | 0.14 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 10 | 0.14 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 14 | 0.14 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 14 | 0.14 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 14 | 0.14 |
| (1,1021) | 1:A:54:LEU:HG | 1:A:51:ALA:HA | 14 | 0.14 |
| (1,1019) | 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:105:PHE:H | 8 | 0.14 |
| (1,1019) | 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:105:PHE:H | 14 | 0.14 |
| (1,1001) | 1:A:20:LYS:HD3 | 1:A:20:LYS:HA | 3 | 0.14 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:52:PHE:HA | 6 | 0.13 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:53:ASP:HA | 6 | 0.13 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:52:PHE:HA | 10 | 0.13 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:53:ASP:HA | 10 | 0.13 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:52:PHE:HA | 15 | 0.13 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:53:ASP:HA | 15 | 0.13 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:52:PHE:HA | 18 | 0.13 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:53:ASP:HA | 18 | 0.13 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG22 | 10 | 0.13 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG21 | 10 | 0.13 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG23 | 10 | 0.13 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG22 | 10 | 0.13 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG21 | 10 | 0.13 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG23 | 10 | 0.13 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG22 | 19 | 0.13 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG21 | 19 | 0.13 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG23 | 19 | 0.13 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG22 | 19 | 0.13 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG21 | 19 | 0.13 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG23 | 19 | 0.13 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 5 | 0.13 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 5 | 0.13 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 7 | 0.13 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 7 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 10 | 0.13 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 10 | 0.13 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 14 | 0.13 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 14 | 0.13 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 17 | 0.13 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 17 | 0.13 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 18 | 0.13 |
| (2,77) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 18 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 1 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 1 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 2 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 2 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 3 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 3 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 4 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 4 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 5 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 5 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 6 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 6 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 7 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 7 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 8 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 8 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 9 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 9 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 10 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 10 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 13 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 13 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 15 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 15 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 16 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 16 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 17 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 17 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 18 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 18 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 19 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 19 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD1 | 20 | 0.13 |
| (2,60) | 1:A:105:PHE:HZ | 1:A:105:PHE:HD2 | 20 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 9 | 0.13 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 9 | 0.13 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 9 | 0.13 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 9 | 0.13 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 9 | 0.13 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 9 | 0.13 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG12 | 9 | 0.13 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG11 | 9 | 0.13 |
| (2,6) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG13 | 9 | 0.13 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD22 | 9 | 0.13 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD21 | 9 | 0.13 |
| (2,6) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HD23 | 9 | 0.13 |
| (2,57) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:5:TYR:HE1 | 3 | 0.13 |
| (2,57) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:5:TYR:HE1 | 3 | 0.13 |
| (2,57) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:5:TYR:HE1 | 13 | 0.13 |
| (2,57) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:5:TYR:HE1 | 13 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 2 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 2 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 2 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 2 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 2 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 2 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 3 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 3 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 3 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 3 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 3 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 3 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 8 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 8 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 8 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 8 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 8 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 8 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 15 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 15 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 15 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 15 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 15 | 0.13 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 15 | 0.13 |
| (2,551) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:20:LYS:HG3 | 12 | 0.13 |
| (2,551) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:56:ARG:HG3 | 12 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,551) | 1:A:60:GLY:H | 1:A:56:ARG:HG2 | 12 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 1 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 1 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 2 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 2 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 3 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 3 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 5 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 5 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 6 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 6 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 7 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 7 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 9 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 9 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 10 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 10 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 11 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 11 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 12 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 12 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 13 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 13 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 14 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 14 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 15 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 15 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 16 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 16 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 17 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 17 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 18 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 18 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 19 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 19 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 20 | 0.13 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 20 | 0.13 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 17 | 0.13 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 17 | 0.13 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 17 | 0.13 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 17 | 0.13 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 18 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 18 | 0.13 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 18 | 0.13 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 18 | 0.13 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HG22 | 11 | 0.13 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HG21 | 11 | 0.13 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HG23 | 11 | 0.13 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:118:VAL:HG22 | 11 | 0.13 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:118:VAL:HG21 | 11 | 0.13 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:118:VAL:HG23 | 11 | 0.13 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG21 | 2 | 0.13 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG22 | 2 | 0.13 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG23 | 2 | 0.13 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG21 | 2 | 0.13 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG22 | 2 | 0.13 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG23 | 2 | 0.13 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 11 | 0.13 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 11 | 0.13 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 11 | 0.13 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 11 | 0.13 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 11 | 0.13 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 11 | 0.13 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:32:LEU:HD12 | 11 | 0.13 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:32:LEU:HD11 | 11 | 0.13 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:32:LEU:HD13 | 11 | 0.13 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:92:CYS:HB2 | 5 | 0.13 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:91:ASN:HB2 | 5 | 0.13 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 15 | 0.13 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 15 | 0.13 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 15 | 0.13 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 15 | 0.13 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 5 | 0.13 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 5 | 0.13 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 5 | 0.13 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 5 | 0.13 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 5 | 0.13 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 5 | 0.13 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 6 | 0.13 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 6 | 0.13 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 6 | 0.13 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 6 | 0.13 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 6 | 0.13 |
| (2,485) | 1:A:44:ARG:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 6 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|------------------|----------|---------------|
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 12 | 0.13 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 12 | 0.13 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 12 | 0.13 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD12 | 12 | 0.13 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD11 | 12 | 0.13 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD13 | 12 | 0.13 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 17 | 0.13 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 17 | 0.13 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 17 | 0.13 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD12 | 17 | 0.13 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD11 | 17 | 0.13 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD13 | 17 | 0.13 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB2 | 11 | 0.13 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB3 | 11 | 0.13 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB2 | 16 | 0.13 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB3 | 16 | 0.13 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB2 | 17 | 0.13 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB3 | 17 | 0.13 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD12 | 8 | 0.13 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD11 | 8 | 0.13 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD13 | 8 | 0.13 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD22 | 8 | 0.13 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD21 | 8 | 0.13 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD23 | 8 | 0.13 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD12 | 15 | 0.13 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD11 | 15 | 0.13 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD13 | 15 | 0.13 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD22 | 15 | 0.13 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD21 | 15 | 0.13 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD23 | 15 | 0.13 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HG3 | 2 | 0.13 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 2 | 0.13 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 2 | 0.13 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HA | 4 | 0.13 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:18:THR:HB | 4 | 0.13 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HA | 8 | 0.13 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:18:THR:HB | 8 | 0.13 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HA | 11 | 0.13 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:18:THR:HB | 11 | 0.13 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HA | 20 | 0.13 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:18:THR:HB | 20 | 0.13 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB2 | 8 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB1 | 8 | 0.13 |
| (2,398) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:12:ALA:HB3 | 8 | 0.13 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB2 | 8 | 0.13 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB1 | 8 | 0.13 |
| (2,398) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:126:ALA:HB3 | 8 | 0.13 |
| (2,388) | 1:A:135:LEU:H | 1:A:134:GLY:H | 20 | 0.13 |
| (2,388) | 1:A:135:LEU:H | 1:A:136:ASN:H | 20 | 0.13 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB3 | 8 | 0.13 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB3 | 8 | 0.13 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB3 | 8 | 0.13 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB2 | 8 | 0.13 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB2 | 8 | 0.13 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB2 | 8 | 0.13 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:100:THR:HB | 14 | 0.13 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:100:THR:HB | 14 | 0.13 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:100:THR:HB | 14 | 0.13 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:65:ASP:HA | 14 | 0.13 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:65:ASP:HA | 14 | 0.13 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:65:ASP:HA | 14 | 0.13 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:92:CYS:HB3 | 2 | 0.13 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:92:CYS:HB3 | 2 | 0.13 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:92:CYS:HB3 | 2 | 0.13 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HB2 | 2 | 0.13 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HB2 | 2 | 0.13 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HB2 | 2 | 0.13 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:35:GLU:H | 12 | 0.13 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:35:GLU:H | 12 | 0.13 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:35:GLU:H | 12 | 0.13 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:37:ASN:H | 12 | 0.13 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:37:ASN:H | 12 | 0.13 |
| (2,343) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:37:ASN:H | 12 | 0.13 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:33:VAL:HB | 3 | 0.13 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:33:VAL:HB | 3 | 0.13 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:33:VAL:HB | 3 | 0.13 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:118:VAL:HB | 3 | 0.13 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:118:VAL:HB | 3 | 0.13 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:118:VAL:HB | 3 | 0.13 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 10 | 0.13 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 10 | 0.13 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 10 | 0.13 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 10 | 0.13 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 10 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 10 | 0.13 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:21:LEU:HG | 11 | 0.13 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:21:LEU:HG | 11 | 0.13 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:21:LEU:HG | 11 | 0.13 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG22 | 1:A:36:ILE:HG13 | 11 | 0.13 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG21 | 1:A:36:ILE:HG13 | 11 | 0.13 |
| (2,338) | 1:A:23:ILE:HG23 | 1:A:36:ILE:HG13 | 11 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 2 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 2 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 2 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 2 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 2 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 2 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 9 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 9 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 9 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 9 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 9 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 9 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 14 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 14 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 14 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 14 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 14 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 14 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 20 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 20 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 20 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 20 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 20 | 0.13 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 20 | 0.13 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 6 | 0.13 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 6 | 0.13 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 6 | 0.13 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 6 | 0.13 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 6 | 0.13 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 6 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:85:PHE:HE1 | 3 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:85:PHE:HE1 | 3 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:85:PHE:HE1 | 3 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG22 | 3 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG21 | 3 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG23 | 3 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:85:PHE:HE1 | 6 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:85:PHE:HE1 | 6 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:85:PHE:HE1 | 6 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG22 | 6 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG21 | 6 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG23 | 6 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:85:PHE:HE1 | 9 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:85:PHE:HE1 | 9 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:85:PHE:HE1 | 9 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG22 | 9 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG21 | 9 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG23 | 9 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:85:PHE:HE1 | 16 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:85:PHE:HE1 | 16 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:85:PHE:HE1 | 16 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG22 | 16 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG21 | 16 | 0.13 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG23 | 16 | 0.13 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 4 | 0.13 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 4 | 0.13 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 4 | 0.13 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 4 | 0.13 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 4 | 0.13 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 4 | 0.13 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:26:CYS:H | 7 | 0.13 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:26:CYS:H | 7 | 0.13 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:26:CYS:H | 7 | 0.13 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:33:VAL:H | 7 | 0.13 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:33:VAL:H | 7 | 0.13 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:33:VAL:H | 7 | 0.13 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:26:CYS:H | 17 | 0.13 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:26:CYS:H | 17 | 0.13 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:26:CYS:H | 17 | 0.13 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:33:VAL:H | 17 | 0.13 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:33:VAL:H | 17 | 0.13 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:33:VAL:H | 17 | 0.13 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 17 | 0.13 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 17 | 0.13 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 17 | 0.13 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:119:LYS:H | 17 | 0.13 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:119:LYS:H | 17 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:119:LYS:H | 17 | 0.13 |
| (2,294) | 1:A:25:GLU:HB3 | 1:A:18:THR:HG21 | 11 | 0.13 |
| (2,294) | 1:A:25:GLU:HB3 | 1:A:18:THR:HG22 | 11 | 0.13 |
| (2,294) | 1:A:25:GLU:HB3 | 1:A:18:THR:HG23 | 11 | 0.13 |
| (2,294) | 1:A:44:ARG:HB3 | 1:A:45:LYS:HG3 | 11 | 0.13 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:4:LYS:HA | 6 | 0.13 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:4:LYS:HA | 6 | 0.13 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:4:LYS:HA | 8 | 0.13 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:4:LYS:HA | 8 | 0.13 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:4:LYS:HA | 13 | 0.13 |
| (2,27) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:4:LYS:HA | 13 | 0.13 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 2 | 0.13 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 2 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 5 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 5 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 5 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 5 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 6 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 6 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 6 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 6 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 11 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 11 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 11 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 11 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 12 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 12 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 12 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 12 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 15 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 15 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 15 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 15 | 0.13 |
| (2,211) | 1:A:94:ASN:HA | 1:A:93:LEU:HA | 2 | 0.13 |
| (2,211) | 1:A:94:ASN:HA | 1:A:99:GLU:HA | 2 | 0.13 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HD2 | 5 | 0.13 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 5 | 0.13 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 5 | 0.13 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HD2 | 7 | 0.13 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 7 | 0.13 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 7 | 0.13 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HD2 | 9 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 9 | 0.13 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 9 | 0.13 |
| (2,201) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HB2 | 4 | 0.13 |
| (2,201) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HB3 | 4 | 0.13 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 13 | 0.13 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 13 | 0.13 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 13 | 0.13 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 13 | 0.13 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 13 | 0.13 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 13 | 0.13 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 18 | 0.13 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 18 | 0.13 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 18 | 0.13 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 18 | 0.13 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 18 | 0.13 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 18 | 0.13 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD22 | 2 | 0.13 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD21 | 2 | 0.13 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD23 | 2 | 0.13 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 2 | 0.13 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 2 | 0.13 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 2 | 0.13 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 2 | 0.13 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 2 | 0.13 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 2 | 0.13 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD22 | 14 | 0.13 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD21 | 14 | 0.13 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD23 | 14 | 0.13 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 14 | 0.13 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 14 | 0.13 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 14 | 0.13 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 14 | 0.13 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 14 | 0.13 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 14 | 0.13 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:113:ASN:HA | 6 | 0.13 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:117:ASP:HA | 6 | 0.13 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:113:ASN:HA | 7 | 0.13 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:117:ASP:HA | 7 | 0.13 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:113:ASN:HA | 8 | 0.13 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:117:ASP:HA | 8 | 0.13 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:113:ASN:HA | 10 | 0.13 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:117:ASP:HA | 10 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:113:ASN:HA | 12 | 0.13 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:117:ASP:HA | 12 | 0.13 |
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 3 | 0.13 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 3 | 0.13 |
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 4 | 0.13 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 4 | 0.13 |
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 13 | 0.13 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 13 | 0.13 |
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 17 | 0.13 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 17 | 0.13 |
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 18 | 0.13 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 18 | 0.13 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HG22 | 17 | 0.13 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HG21 | 17 | 0.13 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HG23 | 17 | 0.13 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HG22 | 17 | 0.13 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HG21 | 17 | 0.13 |
| (2,135) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HG23 | 17 | 0.13 |
| (2,124) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HB | 6 | 0.13 |
| (2,124) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HB | 6 | 0.13 |
| (2,124) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HB | 14 | 0.13 |
| (2,124) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HB | 14 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:101:ILE:HB | 1 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:56:ARG:HB3 | 1 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:101:ILE:HB | 1 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:101:ILE:HB | 3 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:56:ARG:HB3 | 3 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:101:ILE:HB | 3 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:101:ILE:HB | 6 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:56:ARG:HB3 | 6 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:101:ILE:HB | 6 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:101:ILE:HB | 12 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:56:ARG:HB3 | 12 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:101:ILE:HB | 12 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:101:ILE:HB | 13 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:56:ARG:HB3 | 13 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:101:ILE:HB | 13 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:101:ILE:HB | 15 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:56:ARG:HB3 | 15 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:101:ILE:HB | 15 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD2 | 1:A:101:ILE:HB | 18 | 0.13 |
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:56:ARG:HB3 | 18 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,123) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:101:ILE:HB | 18 | 0.13 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HE1 | 1 | 0.13 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HE1 | 1 | 0.13 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HE1 | 5 | 0.13 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HE1 | 5 | 0.13 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HE1 | 7 | 0.13 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HE1 | 7 | 0.13 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HE1 | 16 | 0.13 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HE1 | 16 | 0.13 |
| (1,952) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HG12 | 7 | 0.13 |
| (1,936) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:124:GLU:H | 13 | 0.13 |
| (1,933) | 1:A:121:ARG:HB2 | 1:A:121:ARG:HD2 | 18 | 0.13 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 2 | 0.13 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 9 | 0.13 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 14 | 0.13 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 15 | 0.13 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 5 | 0.13 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 15 | 0.13 |
| (1,836) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 15 | 0.13 |
| (1,798) | 1:A:78:GLU:HG2 | 1:A:79:ASN:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD22 | 10 | 0.13 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD21 | 10 | 0.13 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD23 | 10 | 0.13 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD22 | 17 | 0.13 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD21 | 17 | 0.13 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD23 | 17 | 0.13 |
| (1,752) | 1:A:91:ASN:HB3 | 1:A:92:CYS:H | 16 | 0.13 |
| (1,740) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:19:ASN:HB3 | 11 | 0.13 |
| (1,740) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:19:ASN:HB3 | 16 | 0.13 |
| (1,728) | 1:A:136:ASN:HB3 | 1:A:136:ASN:HA | 8 | 0.13 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 4 | 0.13 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 5 | 0.13 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 8 | 0.13 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 11 | 0.13 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 13 | 0.13 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 15 | 0.13 |
| (1,707) | 1:A:22:ASP:HA | 1:A:22:ASP:HB3 | 17 | 0.13 |
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 10 | 0.13 |
| (1,678) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 7 | 0.13 |
| (1,63) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:109:VAL:HA | 5 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,63) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:109:VAL:HA | 11 | 0.13 |
| (1,63) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:109:VAL:HA | 13 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 1 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 1 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 1 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 2 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 2 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 2 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 12 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 12 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 12 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 15 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 15 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 15 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 17 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 17 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 17 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 18 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 18 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 18 | 0.13 |
| (1,597) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:83:VAL:H | 2 | 0.13 |
| (1,597) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:83:VAL:H | 3 | 0.13 |
| (1,597) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:83:VAL:H | 4 | 0.13 |
| (1,597) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:83:VAL:H | 5 | 0.13 |
| (1,597) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:83:VAL:H | 7 | 0.13 |
| (1,597) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:83:VAL:H | 9 | 0.13 |
| (1,597) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:83:VAL:H | 15 | 0.13 |
| (1,597) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:83:VAL:H | 18 | 0.13 |
| (1,597) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:83:VAL:H | 19 | 0.13 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG22 | 4 | 0.13 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG21 | 4 | 0.13 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG23 | 4 | 0.13 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG22 | 11 | 0.13 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG21 | 11 | 0.13 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG23 | 11 | 0.13 |
| (1,591) | 1:A:141:ALA:HA | 1:A:142:GLN:HB2 | 8 | 0.13 |
| (1,591) | 1:A:141:ALA:HA | 1:A:142:GLN:HB2 | 13 | 0.13 |
| (1,591) | 1:A:141:ALA:HA | 1:A:142:GLN:HB2 | 16 | 0.13 |
| (1,570) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:137:ASP:H | 3 | 0.13 |
| (1,570) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:137:ASP:H | 11 | 0.13 |
| (1,570) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:137:ASP:H | 13 | 0.13 |
| (1,554) | 1:A:147:HIS:HA | 1:A:147:HIS:HD2 | 13 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,554) | 1:A:147:HIS:HA | 1:A:147:HIS:HD2 | 20 | 0.13 |
| (1,552) | 1:A:137:ASP:HA | 1:A:138:ILE:HA | 8 | 0.13 |
| (1,545) | 1:A:81:LYS:HA | 1:A:81:LYS:HG3 | 15 | 0.13 |
| (1,535) | 1:A:39:SER:HA | 1:A:38:LYS:HG2 | 2 | 0.13 |
| (1,527) | 1:A:145:GLU:HA | 1:A:146:TRP:HB3 | 10 | 0.13 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 6 | 0.13 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 8 | 0.13 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 11 | 0.13 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 13 | 0.13 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 19 | 0.13 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 20 | 0.13 |
| (1,51) | 1:A:52:PHE:HD2 | 1:A:66:PHE:HD2 | 9 | 0.13 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 2 | 0.13 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 10 | 0.13 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 12 | 0.13 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 13 | 0.13 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 14 | 0.13 |
| (1,496) | 1:A:6:PHE:HA | 1:A:9:VAL:HG22 | 13 | 0.13 |
| (1,496) | 1:A:6:PHE:HA | 1:A:9:VAL:HG21 | 13 | 0.13 |
| (1,496) | 1:A:6:PHE:HA | 1:A:9:VAL:HG23 | 13 | 0.13 |
| (1,454) | 1:A:57:GLU:HA | 1:A:57:GLU:HB2 | 8 | 0.13 |
| (1,454) | 1:A:57:GLU:HA | 1:A:57:GLU:HB2 | 10 | 0.13 |
| (1,454) | 1:A:57:GLU:HA | 1:A:57:GLU:HB2 | 11 | 0.13 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 6 | 0.13 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 6 | 0.13 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 6 | 0.13 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD22 | 16 | 0.13 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD21 | 16 | 0.13 |
| (1,45) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:69:LEU:HD23 | 16 | 0.13 |
| (1,438) | 1:A:47:LYS:HA | 1:A:44:ARG:HA | 3 | 0.13 |
| (1,415) | 1:A:97:SER:HA | 1:A:96:PRO:HB2 | 5 | 0.13 |
| (1,415) | 1:A:97:SER:HA | 1:A:96:PRO:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,415) | 1:A:97:SER:HA | 1:A:96:PRO:HB2 | 19 | 0.13 |
| (1,40) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:7:SER:HB3 | 17 | 0.13 |
| (1,391) | 1:A:138:ILE:HA | 1:A:138:ILE:HG13 | 17 | 0.13 |
| (1,387) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:65:ASP:HB3 | 18 | 0.13 |
| (1,383) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:HA | 5 | 0.13 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 1 | 0.13 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 4 | 0.13 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 5 | 0.13 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 6 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 8 | 0.13 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 9 | 0.13 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 10 | 0.13 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 12 | 0.13 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 13 | 0.13 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 16 | 0.13 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 17 | 0.13 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 18 | 0.13 |
| (1,371) | 1:A:46:ILE:HA | 1:A:46:ILE:HB | 19 | 0.13 |
| (1,370) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:98:ILE:H | 3 | 0.13 |
| (1,355) | 1:A:110:SER:HB3 | 1:A:111:ILE:HG12 | 12 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG21 | 1 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG22 | 1 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG23 | 1 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG21 | 1 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG22 | 1 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG23 | 1 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG21 | 1 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG22 | 1 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG23 | 1 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG21 | 6 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG22 | 6 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG23 | 6 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG21 | 6 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG22 | 6 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG23 | 6 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG21 | 6 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG22 | 6 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG23 | 6 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG21 | 8 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG22 | 8 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG23 | 8 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG21 | 8 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG22 | 8 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG23 | 8 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG21 | 8 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG22 | 8 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG23 | 8 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG21 | 14 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG22 | 14 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG23 | 14 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG21 | 14 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG22 | 14 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG23 | 14 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG21 | 14 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG22 | 14 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG23 | 14 | 0.13 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 6 | 0.13 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 11 | 0.13 |
| (1,248) | 1:A:75:PHE:HE1 | 1:A:74:ARG:HA | 11 | 0.13 |
| (1,237) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:114:VAL:HG12 | 3 | 0.13 |
| (1,237) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:114:VAL:HG11 | 3 | 0.13 |
| (1,237) | 1:A:6:PHE:HD2 | 1:A:114:VAL:HG13 | 3 | 0.13 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG22 | 19 | 0.13 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG21 | 19 | 0.13 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG23 | 19 | 0.13 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG22 | 19 | 0.13 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG21 | 19 | 0.13 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG23 | 19 | 0.13 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG22 | 19 | 0.13 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG21 | 19 | 0.13 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG23 | 19 | 0.13 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE2 | 16 | 0.13 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE1 | 16 | 0.13 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE3 | 16 | 0.13 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE2 | 16 | 0.13 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE1 | 16 | 0.13 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE3 | 16 | 0.13 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE2 | 16 | 0.13 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE1 | 16 | 0.13 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE3 | 16 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG22 | 4 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG21 | 4 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG23 | 4 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG22 | 4 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG21 | 4 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG23 | 4 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG22 | 4 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG21 | 4 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG23 | 4 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 8 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 8 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 8 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 13 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 13 | 0.13 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 13 | 0.13 |
| (1,2273) | 1:A:115:VAL:H | 1:A:116:THR:HB | 5 | 0.13 |
| (1,2273) | 1:A:115:VAL:H | 1:A:116:THR:HB | 7 | 0.13 |
| (1,2273) | 1:A:115:VAL:H | 1:A:116:THR:HB | 19 | 0.13 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 12 | 0.13 |
| (1,2224) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:77:ILE:HG12 | 12 | 0.13 |
| (1,2224) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:77:ILE:HG12 | 19 | 0.13 |
| (1,2223) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:81:LYS:HG3 | 1 | 0.13 |
| (1,2223) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:81:LYS:HG3 | 8 | 0.13 |
| (1,2223) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:81:LYS:HG3 | 14 | 0.13 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 2 | 0.13 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 2 | 0.13 |
| (1,2207) | 1:A:64:ALA:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 2 | 0.13 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 5 | 0.13 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 12 | 0.13 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 5 | 0.13 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 5 | 0.13 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 5 | 0.13 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 7 | 0.13 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 7 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 7 | 0.13 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 11 | 0.13 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 11 | 0.13 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 11 | 0.13 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 14 | 0.13 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 14 | 0.13 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 14 | 0.13 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 17 | 0.13 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 17 | 0.13 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 17 | 0.13 |
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 3 | 0.13 |
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 5 | 0.13 |
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 11 | 0.13 |
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 20 | 0.13 |
| (1,216) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HG2 | 11 | 0.13 |
| (1,2142) | 1:A:106:ASN:H | 1:A:106:ASN:HD22 | 8 | 0.13 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 11 | 0.13 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 11 | 0.13 |
| (1,2141) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 11 | 0.13 |
| (1,2138) | 1:A:28:THR:H | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.13 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG12 | 5 | 0.13 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG11 | 5 | 0.13 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG13 | 5 | 0.13 |
| (1,2074) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:84:ASN:HA | 2 | 0.13 |
| (1,2040) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB2 | 6 | 0.13 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 10 | 0.13 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 20 | 0.13 |
| (1,2005) | 1:A:127:SER:H | 1:A:126:ALA:HA | 20 | 0.13 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG22 | 15 | 0.13 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG21 | 15 | 0.13 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG23 | 15 | 0.13 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG22 | 16 | 0.13 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG21 | 16 | 0.13 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG23 | 16 | 0.13 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD22 | 3 | 0.13 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD21 | 3 | 0.13 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD23 | 3 | 0.13 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD22 | 8 | 0.13 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD21 | 8 | 0.13 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD23 | 8 | 0.13 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD22 | 12 | 0.13 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD21 | 12 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD23 | 12 | 0.13 |
| (1,1924) | 1:A:85:PHE:H | 1:A:84:ASN:HB3 | 9 | 0.13 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 2 | 0.13 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 3 | 0.13 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 4 | 0.13 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 10 | 0.13 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 13 | 0.13 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 17 | 0.13 |
| (1,1855) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HD12 | 5 | 0.13 |
| (1,1855) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HD11 | 5 | 0.13 |
| (1,1855) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HD13 | 5 | 0.13 |
| (1,1855) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HD12 | 13 | 0.13 |
| (1,1855) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HD11 | 13 | 0.13 |
| (1,1855) | 1:A:136:ASN:H | 1:A:135:LEU:HD13 | 13 | 0.13 |
| (1,1852) | 1:A:135:LEU:H | 1:A:136:ASN:H | 7 | 0.13 |
| (1,1851) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HD22 | 9 | 0.13 |
| (1,1851) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HD21 | 9 | 0.13 |
| (1,1851) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HD23 | 9 | 0.13 |
| (1,1850) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 8 | 0.13 |
| (1,1850) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 12 | 0.13 |
| (1,1850) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 14 | 0.13 |
| (1,1850) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 18 | 0.13 |
| (1,1850) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 19 | 0.13 |
| (1,1841) | 1:A:72:ASN:H | 1:A:72:ASN:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 2 | 0.13 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 5 | 0.13 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 6 | 0.13 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 9 | 0.13 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 10 | 0.13 |
| (1,1809) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:35:GLU:HG3 | 9 | 0.13 |
| (1,1809) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:35:GLU:HG3 | 12 | 0.13 |
| (1,1746) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:109:VAL:HB | 2 | 0.13 |
| (1,1746) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:109:VAL:HB | 3 | 0.13 |
| (1,1746) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:109:VAL:HB | 10 | 0.13 |
| (1,1746) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:109:VAL:HB | 11 | 0.13 |
| (1,1746) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:109:VAL:HB | 12 | 0.13 |
| (1,1746) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:109:VAL:HB | 18 | 0.13 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 9 | 0.13 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 4 | 0.13 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 4 | 0.13 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 4 | 0.13 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 6 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 6 | 0.13 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,1678) | 1:A:47:LYS:H | 1:A:47:LYS:HG2 | 1 | 0.13 |
| (1,1676) | 1:A:137:ASP:H | 1:A:135:LEU:HD12 | 19 | 0.13 |
| (1,1676) | 1:A:137:ASP:H | 1:A:135:LEU:HD11 | 19 | 0.13 |
| (1,1676) | 1:A:137:ASP:H | 1:A:135:LEU:HD13 | 19 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 3 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 6 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 7 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 13 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 17 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 18 | 0.13 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 19 | 0.13 |
| (1,1643) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG3 | 3 | 0.13 |
| (1,1643) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG3 | 10 | 0.13 |
| (1,1615) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:113:ASN:HB3 | 2 | 0.13 |
| (1,1555) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:124:GLU:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,1555) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:124:GLU:HB3 | 16 | 0.13 |
| (1,1554) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:123:PHE:HB2 | 12 | 0.13 |
| (1,1542) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 12 | 0.13 |
| (1,1542) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 13 | 0.13 |
| (1,1542) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,1529) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:141:ALA:HB2 | 5 | 0.13 |
| (1,1529) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:141:ALA:HB1 | 5 | 0.13 |
| (1,1529) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:141:ALA:HB3 | 5 | 0.13 |
| (1,1513) | 1:A:99:GLU:H | 1:A:100:THR:HB | 14 | 0.13 |
| (1,1450) | 1:A:146:TRP:H | 1:A:147:HIS:H | 3 | 0.13 |
| (1,1434) | 1:A:91:ASN:H | 1:A:91:ASN:HD22 | 16 | 0.13 |
| (1,1420) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:144:ILE:HB | 2 | 0.13 |
| (1,1420) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:144:ILE:HB | 19 | 0.13 |
| (1,141) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:66:PHE:HD1 | 7 | 0.13 |
| (1,141) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:66:PHE:HD1 | 9 | 0.13 |
| (1,141) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:66:PHE:HD1 | 14 | 0.13 |
| (1,141) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:66:PHE:HD1 | 19 | 0.13 |
| (1,1404) | 1:A:12:ALA:H | 1:A:11:SER:HA | 4 | 0.13 |
| (1,1404) | 1:A:12:ALA:H | 1:A:11:SER:HA | 12 | 0.13 |
| (1,1404) | 1:A:12:ALA:H | 1:A:11:SER:HA | 18 | 0.13 |
| (1,1396) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:148:GLU:HB3 | 5 | 0.13 |
| (1,1363) | 1:A:120:LYS:H | 1:A:120:LYS:HG2 | 13 | 0.13 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HA | 9 | 0.13 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HA | 9 | 0.13 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HA | 9 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HA | 20 | 0.13 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HA | 20 | 0.13 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HA | 20 | 0.13 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:123:PHE:HD2 | 10 | 0.13 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:123:PHE:HD2 | 10 | 0.13 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:123:PHE:HD2 | 10 | 0.13 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG21 | 10 | 0.13 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG22 | 10 | 0.13 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG23 | 10 | 0.13 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG21 | 13 | 0.13 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG22 | 13 | 0.13 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG23 | 13 | 0.13 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG21 | 16 | 0.13 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG22 | 16 | 0.13 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG23 | 16 | 0.13 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:LYS:HA | 8 | 0.13 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:47:LYS:HA | 8 | 0.13 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:47:LYS:HA | 8 | 0.13 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:LYS:HA | 12 | 0.13 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:47:LYS:HA | 12 | 0.13 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:47:LYS:HA | 12 | 0.13 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:LYS:HA | 14 | 0.13 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:47:LYS:HA | 14 | 0.13 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:47:LYS:HA | 14 | 0.13 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:74:ARG:H | 3 | 0.13 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:74:ARG:H | 3 | 0.13 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:74:ARG:H | 3 | 0.13 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:74:ARG:H | 10 | 0.13 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:74:ARG:H | 10 | 0.13 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:74:ARG:H | 10 | 0.13 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:74:ARG:H | 13 | 0.13 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:74:ARG:H | 13 | 0.13 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:74:ARG:H | 13 | 0.13 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:74:ARG:H | 16 | 0.13 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:74:ARG:H | 16 | 0.13 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:74:ARG:H | 16 | 0.13 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 15 | 0.13 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 15 | 0.13 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 15 | 0.13 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HD2 | 7 | 0.13 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HD2 | 7 | 0.13 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HD2 | 7 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HD2 | 13 | 0.13 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HD2 | 13 | 0.13 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HD2 | 13 | 0.13 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD12 | 4 | 0.13 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD11 | 4 | 0.13 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD13 | 4 | 0.13 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD12 | 15 | 0.13 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD11 | 15 | 0.13 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD13 | 15 | 0.13 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD12 | 1:A:144:ILE:HA | 3 | 0.13 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD11 | 1:A:144:ILE:HA | 3 | 0.13 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD13 | 1:A:144:ILE:HA | 3 | 0.13 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD12 | 1:A:123:PHE:HE2 | 5 | 0.13 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD11 | 1:A:123:PHE:HE2 | 5 | 0.13 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD13 | 1:A:123:PHE:HE2 | 5 | 0.13 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD12 | 1:A:123:PHE:HE2 | 15 | 0.13 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD11 | 1:A:123:PHE:HE2 | 15 | 0.13 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD13 | 1:A:123:PHE:HE2 | 15 | 0.13 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 11 | 0.13 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 11 | 0.13 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 11 | 0.13 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 14 | 0.13 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 14 | 0.13 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 14 | 0.13 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 2 | 0.13 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 2 | 0.13 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 2 | 0.13 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 9 | 0.13 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 9 | 0.13 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 9 | 0.13 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 12 | 0.13 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 12 | 0.13 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 12 | 0.13 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 13 | 0.13 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 13 | 0.13 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 13 | 0.13 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 16 | 0.13 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 16 | 0.13 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 16 | 0.13 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 9 | 0.13 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 9 | 0.13 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 9 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 11 | 0.13 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 11 | 0.13 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 11 | 0.13 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG22 | 2 | 0.13 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG21 | 2 | 0.13 |
| (1,1203) | 1:A:67:ILE:H | 1:A:67:ILE:HG23 | 2 | 0.13 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 4 | 0.13 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 4 | 0.13 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 4 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE2 | 9 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE1 | 9 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE3 | 9 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE2 | 9 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE1 | 9 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE3 | 9 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE2 | 9 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE1 | 9 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE3 | 9 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE2 | 13 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE1 | 13 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE3 | 13 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE2 | 13 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE1 | 13 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE3 | 13 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE2 | 13 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE1 | 13 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE3 | 13 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE2 | 20 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE1 | 20 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE3 | 20 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE2 | 20 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE1 | 20 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE3 | 20 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE2 | 20 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE1 | 20 | 0.13 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE3 | 20 | 0.13 |
| (1,116) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HB3 | 1 | 0.13 |
| (1,116) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HB3 | 2 | 0.13 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 14 | 0.13 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 14 | 0.13 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 14 | 0.13 |
| (1,114) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HA | 15 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,114) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HA | 18 | 0.13 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD12 | 10 | 0.13 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD11 | 10 | 0.13 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD13 | 10 | 0.13 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD12 | 10 | 0.13 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD11 | 10 | 0.13 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD13 | 10 | 0.13 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD12 | 10 | 0.13 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD11 | 10 | 0.13 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD13 | 10 | 0.13 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD12 | 11 | 0.13 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD11 | 11 | 0.13 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD13 | 11 | 0.13 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD12 | 11 | 0.13 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD11 | 11 | 0.13 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD13 | 11 | 0.13 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD12 | 11 | 0.13 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD11 | 11 | 0.13 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD13 | 11 | 0.13 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG22 | 1 | 0.13 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG21 | 1 | 0.13 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG23 | 1 | 0.13 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG22 | 13 | 0.13 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG21 | 13 | 0.13 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG23 | 13 | 0.13 |
| (1,1115) | 1:A:33:VAL:HA | 1:A:122:LEU:HD22 | 4 | 0.13 |
| (1,1115) | 1:A:33:VAL:HA | 1:A:122:LEU:HD21 | 4 | 0.13 |
| (1,1115) | 1:A:33:VAL:HA | 1:A:122:LEU:HD23 | 4 | 0.13 |
| (1,1115) | 1:A:33:VAL:HA | 1:A:122:LEU:HD22 | 9 | 0.13 |
| (1,1115) | 1:A:33:VAL:HA | 1:A:122:LEU:HD21 | 9 | 0.13 |
| (1,1115) | 1:A:33:VAL:HA | 1:A:122:LEU:HD23 | 9 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:36:ILE:H | 8 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:36:ILE:H | 8 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:36:ILE:H | 8 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:36:ILE:H | 10 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:36:ILE:H | 10 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:36:ILE:H | 10 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:36:ILE:H | 12 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:36:ILE:H | 12 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:36:ILE:H | 12 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:36:ILE:H | 14 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:36:ILE:H | 14 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:36:ILE:H | 14 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:36:ILE:H | 16 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:36:ILE:H | 16 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:36:ILE:H | 16 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:36:ILE:H | 18 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:36:ILE:H | 18 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:36:ILE:H | 18 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:36:ILE:H | 19 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:36:ILE:H | 19 | 0.13 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:36:ILE:H | 19 | 0.13 |
| (1,1086) | 1:A:115:VAL:HG12 | 1:A:54:LEU:HB3 | 4 | 0.13 |
| (1,1086) | 1:A:115:VAL:HG11 | 1:A:54:LEU:HB3 | 4 | 0.13 |
| (1,1086) | 1:A:115:VAL:HG13 | 1:A:54:LEU:HB3 | 4 | 0.13 |
| (1,1081) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:93:LEU:HD22 | 19 | 0.13 |
| (1,1081) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:93:LEU:HD21 | 19 | 0.13 |
| (1,1081) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:93:LEU:HD23 | 19 | 0.13 |
| (1,1055) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 8 | 0.13 |
| (1,104) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HA | 18 | 0.13 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 19 | 0.13 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 19 | 0.13 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 19 | 0.13 |
| (1,1028) | 1:A:121:ARG:H | 1:A:121:ARG:HG2 | 6 | 0.13 |
| (1,1019) | 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:105:PHE:H | 7 | 0.13 |
| (1,1019) | 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:105:PHE:H | 13 | 0.13 |
| (1,1019) | 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:105:PHE:H | 15 | 0.13 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:52:PHE:HA | 3 | 0.12 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:53:ASP:HA | 3 | 0.12 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:52:PHE:HA | 5 | 0.12 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:53:ASP:HA | 5 | 0.12 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:52:PHE:HA | 12 | 0.12 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:53:ASP:HA | 12 | 0.12 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:52:PHE:HA | 20 | 0.12 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:53:ASP:HA | 20 | 0.12 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 13 | 0.12 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 13 | 0.12 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 20 | 0.12 |
| (2,93) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 20 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HG2 | 7 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:56:ARG:HG2 | 7 | 0.12 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG22 | 5 | 0.12 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG21 | 5 | 0.12 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG23 | 5 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG22 | 5 | 0.12 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG21 | 5 | 0.12 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG23 | 5 | 0.12 |
| (2,57) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:5:TYR:HE1 | 2 | 0.12 |
| (2,57) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:5:TYR:HE1 | 2 | 0.12 |
| (2,57) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:5:TYR:HE1 | 8 | 0.12 |
| (2,57) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:5:TYR:HE1 | 8 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 9 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 9 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 9 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 9 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 9 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 9 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 11 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 11 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 11 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 11 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 11 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 11 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 12 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 12 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 12 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 12 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 12 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 12 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 20 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 20 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 20 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 20 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 20 | 0.12 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 20 | 0.12 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 4 | 0.12 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 4 | 0.12 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD2 | 1:A:5:TYR:HE2 | 8 | 0.12 |
| (2,55) | 1:A:5:TYR:HD1 | 1:A:5:TYR:HE1 | 8 | 0.12 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 20 | 0.12 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 20 | 0.12 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 20 | 0.12 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 20 | 0.12 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 20 | 0.12 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 20 | 0.12 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 20 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 20 | 0.12 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 20 | 0.12 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 3 | 0.12 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 3 | 0.12 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 3 | 0.12 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 3 | 0.12 |
| (2,538) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.12 |
| (2,538) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:31:GLU:HG2 | 2 | 0.12 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG21 | 11 | 0.12 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG22 | 11 | 0.12 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG23 | 11 | 0.12 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG21 | 11 | 0.12 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG22 | 11 | 0.12 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG23 | 11 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 3 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 3 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 3 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 3 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 3 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 3 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 3 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 3 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 3 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 3 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 3 | 0.12 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 3 | 0.12 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:92:CYS:HB2 | 17 | 0.12 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:91:ASN:HB2 | 17 | 0.12 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:92:CYS:HB2 | 18 | 0.12 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:91:ASN:HB2 | 18 | 0.12 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 10 | 0.12 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 10 | 0.12 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 10 | 0.12 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 10 | 0.12 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 17 | 0.12 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 17 | 0.12 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 17 | 0.12 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 17 | 0.12 |
| (2,488) | 1:A:131:SER:H | 1:A:128:GLY:HA3 | 9 | 0.12 |
| (2,488) | 1:A:131:SER:H | 1:A:128:GLY:HA2 | 9 | 0.12 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 15 | 0.12 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 15 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|------------------|----------|---------------|
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 15 | 0.12 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD12 | 15 | 0.12 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD11 | 15 | 0.12 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD13 | 15 | 0.12 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 19 | 0.12 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 19 | 0.12 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 19 | 0.12 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD12 | 19 | 0.12 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD11 | 19 | 0.12 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD13 | 19 | 0.12 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB2 | 4 | 0.12 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB3 | 4 | 0.12 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB2 | 6 | 0.12 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB3 | 6 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD12 | 5 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD11 | 5 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD13 | 5 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD22 | 5 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD21 | 5 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD23 | 5 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD12 | 6 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD11 | 6 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD13 | 6 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD22 | 6 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD21 | 6 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD23 | 6 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD12 | 11 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD11 | 11 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD13 | 11 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD22 | 11 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD21 | 11 | 0.12 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD23 | 11 | 0.12 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG3 | 1 | 0.12 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 1 | 0.12 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG3 | 16 | 0.12 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 16 | 0.12 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG3 | 20 | 0.12 |
| (2,428) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 20 | 0.12 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HA | 7 | 0.12 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:18:THR:HB | 7 | 0.12 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HA | 16 | 0.12 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:18:THR:HB | 16 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG2 | 16 | 0.12 |
| (2,392) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:142:GLN:HG3 | 16 | 0.12 |
| (2,382) | 1:A:117:ASP:H | 1:A:114:VAL:HB | 11 | 0.12 |
| (2,382) | 1:A:117:ASP:H | 1:A:118:VAL:HB | 11 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB3 | 1 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB3 | 1 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB3 | 1 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB2 | 1 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB2 | 1 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB2 | 1 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB3 | 6 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB3 | 6 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB3 | 6 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB2 | 6 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB2 | 6 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB2 | 6 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB3 | 13 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB3 | 13 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB3 | 13 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB2 | 13 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB2 | 13 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB2 | 13 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB3 | 19 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB3 | 19 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB3 | 19 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB2 | 19 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB2 | 19 | 0.12 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB2 | 19 | 0.12 |
| (2,350) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HD1 | 14 | 0.12 |
| (2,350) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HD1 | 14 | 0.12 |
| (2,350) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HD1 | 14 | 0.12 |
| (2,350) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HD2 | 14 | 0.12 |
| (2,350) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HD2 | 14 | 0.12 |
| (2,350) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HD2 | 14 | 0.12 |
| (2,350) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:61:TYR:HE2 | 14 | 0.12 |
| (2,350) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:61:TYR:HE2 | 14 | 0.12 |
| (2,350) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:61:TYR:HE2 | 14 | 0.12 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:33:VAL:HB | 9 | 0.12 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:33:VAL:HB | 9 | 0.12 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:33:VAL:HB | 9 | 0.12 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:118:VAL:HB | 9 | 0.12 |
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:118:VAL:HB | 9 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,342) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:118:VAL:HB | 9 | 0.12 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 1 | 0.12 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 1 | 0.12 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 1 | 0.12 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 1 | 0.12 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 1 | 0.12 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 1 | 0.12 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 17 | 0.12 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 17 | 0.12 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 17 | 0.12 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 17 | 0.12 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 17 | 0.12 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 17 | 0.12 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:121:ARG:HB3 | 20 | 0.12 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:121:ARG:HB3 | 20 | 0.12 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:121:ARG:HB3 | 20 | 0.12 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG12 | 1:A:36:ILE:HB | 20 | 0.12 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG11 | 1:A:36:ILE:HB | 20 | 0.12 |
| (2,332) | 1:A:33:VAL:HG13 | 1:A:36:ILE:HB | 20 | 0.12 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 10 | 0.12 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 10 | 0.12 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 10 | 0.12 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 10 | 0.12 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 10 | 0.12 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 10 | 0.12 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:70:VAL:H | 19 | 0.12 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:70:VAL:H | 19 | 0.12 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:70:VAL:H | 19 | 0.12 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG21 | 1:A:71:ASN:H | 19 | 0.12 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG22 | 1:A:71:ASN:H | 19 | 0.12 |
| (2,329) | 1:A:68:THR:HG23 | 1:A:71:ASN:H | 19 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:85:PHE:HE1 | 4 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:85:PHE:HE1 | 4 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:85:PHE:HE1 | 4 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG22 | 4 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG21 | 4 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG23 | 4 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:85:PHE:HE1 | 13 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:85:PHE:HE1 | 13 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:85:PHE:HE1 | 13 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG22 | 13 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG21 | 13 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG23 | 13 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:85:PHE:HE1 | 15 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:85:PHE:HE1 | 15 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:85:PHE:HE1 | 15 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG22 | 15 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG21 | 15 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG23 | 15 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:85:PHE:HE1 | 17 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:85:PHE:HE1 | 17 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:85:PHE:HE1 | 17 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG22 | 17 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG21 | 17 | 0.12 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG23 | 17 | 0.12 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 19 | 0.12 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 19 | 0.12 |
| (2,325) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 19 | 0.12 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG22 | 19 | 0.12 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG21 | 19 | 0.12 |
| (2,325) | 1:A:112:PHE:H | 1:A:109:VAL:HG23 | 19 | 0.12 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:26:CYS:H | 15 | 0.12 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:26:CYS:H | 15 | 0.12 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:26:CYS:H | 15 | 0.12 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:33:VAL:H | 15 | 0.12 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:33:VAL:H | 15 | 0.12 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:33:VAL:H | 15 | 0.12 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:26:CYS:H | 19 | 0.12 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:26:CYS:H | 19 | 0.12 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:26:CYS:H | 19 | 0.12 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:33:VAL:H | 19 | 0.12 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:33:VAL:H | 19 | 0.12 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:33:VAL:H | 19 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:H | 6 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:H | 6 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:H | 6 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:32:LEU:H | 6 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:32:LEU:H | 6 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:32:LEU:H | 6 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:H | 7 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:H | 7 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:H | 7 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:32:LEU:H | 7 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:32:LEU:H | 7 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:32:LEU:H | 7 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:H | 9 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:H | 9 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:H | 9 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:32:LEU:H | 9 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:32:LEU:H | 9 | 0.12 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:32:LEU:H | 9 | 0.12 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 3 | 0.12 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 3 | 0.12 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 3 | 0.12 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:119:LYS:H | 3 | 0.12 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:119:LYS:H | 3 | 0.12 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:119:LYS:H | 3 | 0.12 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 7 | 0.12 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 7 | 0.12 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 7 | 0.12 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:119:LYS:H | 7 | 0.12 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:119:LYS:H | 7 | 0.12 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:119:LYS:H | 7 | 0.12 |
| (2,305) | 1:A:20:LYS:HD3 | 1:A:20:LYS:HB2 | 3 | 0.12 |
| (2,305) | 1:A:20:LYS:HD3 | 1:A:20:LYS:HB3 | 3 | 0.12 |
| (2,260) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:87:ILE:HA | 6 | 0.12 |
| (2,260) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HA | 6 | 0.12 |
| (2,257) | 1:A:57:GLU:HG3 | 1:A:20:LYS:HG3 | 9 | 0.12 |
| (2,257) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:74:ARG:HG3 | 9 | 0.12 |
| (2,252) | 1:A:19:ASN:HB3 | 1:A:20:LYS:HB2 | 3 | 0.12 |
| (2,252) | 1:A:19:ASN:HB3 | 1:A:20:LYS:HB3 | 3 | 0.12 |
| (2,252) | 1:A:19:ASN:HB3 | 1:A:20:LYS:HB2 | 7 | 0.12 |
| (2,252) | 1:A:19:ASN:HB3 | 1:A:20:LYS:HB3 | 7 | 0.12 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 19 | 0.12 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 19 | 0.12 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 7 | 0.12 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 7 | 0.12 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:6:PHE:HB2 | 19 | 0.12 |
| (2,225) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:6:PHE:HB2 | 19 | 0.12 |
| (2,211) | 1:A:94:ASN:HA | 1:A:93:LEU:HA | 20 | 0.12 |
| (2,211) | 1:A:94:ASN:HA | 1:A:99:GLU:HA | 20 | 0.12 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HD2 | 14 | 0.12 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 14 | 0.12 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 14 | 0.12 |
| (2,201) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HB2 | 14 | 0.12 |
| (2,201) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HB3 | 14 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD12 | 10 | 0.12 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD11 | 10 | 0.12 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:54:LEU:HD13 | 10 | 0.12 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG12 | 10 | 0.12 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG11 | 10 | 0.12 |
| (2,2) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:115:VAL:HG13 | 10 | 0.12 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD22 | 1 | 0.12 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD21 | 1 | 0.12 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD23 | 1 | 0.12 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 1 | 0.12 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 1 | 0.12 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 1 | 0.12 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 1 | 0.12 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 1 | 0.12 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 1 | 0.12 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD22 | 10 | 0.12 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD21 | 10 | 0.12 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD23 | 10 | 0.12 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 10 | 0.12 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 10 | 0.12 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 10 | 0.12 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 10 | 0.12 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 10 | 0.12 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 10 | 0.12 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG3 | 3 | 0.12 |
| (2,184) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:15:LYS:HG2 | 3 | 0.12 |
| (2,170) | 1:A:58:CYS:HA | 1:A:20:LYS:HB2 | 5 | 0.12 |
| (2,170) | 1:A:58:CYS:HA | 1:A:20:LYS:HB3 | 5 | 0.12 |
| (2,164) | 1:A:131:SER:HB3 | 1:A:131:SER:H | 9 | 0.12 |
| (2,164) | 1:A:127:SER:H | 1:A:127:SER:HB3 | 9 | 0.12 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:113:ASN:HA | 4 | 0.12 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:117:ASP:HA | 4 | 0.12 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:113:ASN:HA | 5 | 0.12 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:117:ASP:HA | 5 | 0.12 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:113:ASN:HA | 20 | 0.12 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:117:ASP:HA | 20 | 0.12 |
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 1 | 0.12 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 1 | 0.12 |
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 2 | 0.12 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 2 | 0.12 |
| (2,144) | 1:A:41:THR:HB | 1:A:42:VAL:HB | 12 | 0.12 |
| (2,144) | 1:A:116:THR:HB | 1:A:114:VAL:HB | 12 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,14) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:3:GLY:HA3 | 13 | 0.12 |
| (2,14) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:3:GLY:HA2 | 13 | 0.12 |
| (2,14) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:3:GLY:HA3 | 15 | 0.12 |
| (2,14) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:3:GLY:HA2 | 15 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD22 | 17 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD21 | 17 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD23 | 17 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD22 | 17 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD21 | 17 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD23 | 17 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD22 | 17 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD21 | 17 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD23 | 17 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD22 | 17 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD21 | 17 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD23 | 17 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD22 | 17 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD21 | 17 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD23 | 17 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD22 | 17 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD21 | 17 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD23 | 17 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD22 | 19 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD21 | 19 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:21:LEU:HD23 | 19 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD22 | 19 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD21 | 19 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:21:LEU:HD23 | 19 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD22 | 19 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD21 | 19 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:21:LEU:HD23 | 19 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD22 | 19 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD21 | 19 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD12 | 1:A:54:LEU:HD23 | 19 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD22 | 19 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD21 | 19 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD11 | 1:A:54:LEU:HD23 | 19 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD22 | 19 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD21 | 19 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:17:LEU:HD13 | 1:A:54:LEU:HD23 | 19 | 0.12 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:135:LEU:HD22 | 13 | 0.12 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:135:LEU:HD21 | 13 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:135:LEU:HD23 | 13 | 0.12 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:135:LEU:HD22 | 13 | 0.12 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:135:LEU:HD21 | 13 | 0.12 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:135:LEU:HD23 | 13 | 0.12 |
| (2,125) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:56:ARG:HA | 2 | 0.12 |
| (2,125) | 1:A:66:PHE:HD2 | 1:A:56:ARG:HA | 2 | 0.12 |
| (2,125) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:56:ARG:HA | 3 | 0.12 |
| (2,125) | 1:A:66:PHE:HD2 | 1:A:56:ARG:HA | 3 | 0.12 |
| (2,125) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:56:ARG:HA | 5 | 0.12 |
| (2,125) | 1:A:66:PHE:HD2 | 1:A:56:ARG:HA | 5 | 0.12 |
| (2,125) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:56:ARG:HA | 10 | 0.12 |
| (2,125) | 1:A:66:PHE:HD2 | 1:A:56:ARG:HA | 10 | 0.12 |
| (2,125) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:56:ARG:HA | 13 | 0.12 |
| (2,125) | 1:A:66:PHE:HD2 | 1:A:56:ARG:HA | 13 | 0.12 |
| (2,124) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HB | 18 | 0.12 |
| (2,124) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HB | 18 | 0.12 |
| (2,115) | 1:A:75:PHE:HA | 1:A:85:PHE:HD1 | 13 | 0.12 |
| (2,115) | 1:A:75:PHE:HA | 1:A:85:PHE:HD2 | 13 | 0.12 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HE1 | 18 | 0.12 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HE1 | 18 | 0.12 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HE1 | 20 | 0.12 |
| (2,103) | 1:A:105:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HE1 | 20 | 0.12 |
| (2,1) | 1:A:112:PHE:HE2 | 1:A:108:PHE:HE1 | 13 | 0.12 |
| (2,1) | 1:A:112:PHE:HE1 | 1:A:108:PHE:HE2 | 13 | 0.12 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD22 | 12 | 0.12 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD21 | 12 | 0.12 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD23 | 12 | 0.12 |
| (1,952) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HG12 | 8 | 0.12 |
| (1,952) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HG12 | 14 | 0.12 |
| (1,935) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:124:GLU:HB2 | 18 | 0.12 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 7 | 0.12 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 10 | 0.12 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 12 | 0.12 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 13 | 0.12 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 16 | 0.12 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 18 | 0.12 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 20 | 0.12 |
| (1,880) | 1:A:45:LYS:HB3 | 1:A:45:LYS:H | 12 | 0.12 |
| (1,864) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:83:VAL:HB | 9 | 0.12 |
| (1,836) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 3 | 0.12 |
| (1,836) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:16:GLN:HG2 | 14 | 0.12 |
| (1,813) | 1:A:88:GLU:HG2 | 1:A:73:MET:HA | 4 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,813) | 1:A:88:GLU:HG2 | 1:A:73:MET:HA | 19 | 0.12 |
| (1,813) | 1:A:88:GLU:HG2 | 1:A:73:MET:HA | 20 | 0.12 |
| (1,797) | 1:A:78:GLU:HG2 | 1:A:78:GLU:HA | 2 | 0.12 |
| (1,797) | 1:A:78:GLU:HG2 | 1:A:78:GLU:HA | 5 | 0.12 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD22 | 12 | 0.12 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD21 | 12 | 0.12 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD23 | 12 | 0.12 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD22 | 20 | 0.12 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD21 | 20 | 0.12 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD23 | 20 | 0.12 |
| (1,740) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:19:ASN:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,740) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:19:ASN:HB3 | 6 | 0.12 |
| (1,740) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:19:ASN:HB3 | 10 | 0.12 |
| (1,74) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:113:ASN:HA | 5 | 0.12 |
| (1,731) | 1:A:136:ASN:HB2 | 1:A:136:ASN:HA | 5 | 0.12 |
| (1,731) | 1:A:136:ASN:HB2 | 1:A:136:ASN:HA | 12 | 0.12 |
| (1,731) | 1:A:136:ASN:HB2 | 1:A:136:ASN:HA | 13 | 0.12 |
| (1,731) | 1:A:136:ASN:HB2 | 1:A:136:ASN:HA | 16 | 0.12 |
| (1,731) | 1:A:136:ASN:HB2 | 1:A:136:ASN:HA | 17 | 0.12 |
| (1,730) | 1:A:136:ASN:HD22 | 1:A:136:ASN:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,729) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,715) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:23:ILE:HB | 14 | 0.12 |
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 1 | 0.12 |
| (1,668) | 1:A:137:ASP:HB2 | 1:A:138:ILE:H | 17 | 0.12 |
| (1,656) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:53:ASP:H | 5 | 0.12 |
| (1,636) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:76:LYS:HB3 | 12 | 0.12 |
| (1,63) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:109:VAL:HA | 4 | 0.12 |
| (1,63) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:109:VAL:HA | 14 | 0.12 |
| (1,63) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:109:VAL:HA | 19 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 4 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 4 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 4 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 6 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 6 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 6 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 7 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 7 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 7 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 8 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 8 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 8 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 9 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 9 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 9 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 11 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 11 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 11 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 13 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 13 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 13 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 14 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 14 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 14 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 16 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 16 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 16 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 20 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 20 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 20 | 0.12 |
| (1,597) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:83:VAL:H | 6 | 0.12 |
| (1,597) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:83:VAL:H | 10 | 0.12 |
| (1,597) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:83:VAL:H | 13 | 0.12 |
| (1,597) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:83:VAL:H | 14 | 0.12 |
| (1,597) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:83:VAL:H | 16 | 0.12 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG22 | 9 | 0.12 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG21 | 9 | 0.12 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG23 | 9 | 0.12 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG22 | 20 | 0.12 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG21 | 20 | 0.12 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG23 | 20 | 0.12 |
| (1,591) | 1:A:141:ALA:HA | 1:A:142:GLN:HB2 | 6 | 0.12 |
| (1,591) | 1:A:141:ALA:HA | 1:A:142:GLN:HB2 | 11 | 0.12 |
| (1,591) | 1:A:141:ALA:HA | 1:A:142:GLN:HB2 | 18 | 0.12 |
| (1,591) | 1:A:141:ALA:HA | 1:A:142:GLN:HB2 | 19 | 0.12 |
| (1,586) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:24:ASN:HA | 7 | 0.12 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD12 | 2 | 0.12 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD11 | 2 | 0.12 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD13 | 2 | 0.12 |
| (1,570) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:137:ASP:H | 9 | 0.12 |
| (1,570) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:137:ASP:H | 17 | 0.12 |
| (1,564) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HG | 14 | 0.12 |
| (1,564) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HG | 16 | 0.12 |
| (1,552) | 1:A:137:ASP:HA | 1:A:138:ILE:HA | 4 | 0.12 |
| (1,552) | 1:A:137:ASP:HA | 1:A:138:ILE:HA | 14 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,527) | 1:A:145:GLU:HA | 1:A:146:TRP:HB3 | 14 | 0.12 |
| (1,527) | 1:A:145:GLU:HA | 1:A:146:TRP:HB3 | 17 | 0.12 |
| (1,52) | 1:A:52:PHE:HD2 | 1:A:53:ASP:HB2 | 7 | 0.12 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 1 | 0.12 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 2 | 0.12 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 4 | 0.12 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 7 | 0.12 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 9 | 0.12 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 10 | 0.12 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 12 | 0.12 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 16 | 0.12 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 17 | 0.12 |
| (1,510) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HB2 | 18 | 0.12 |
| (1,51) | 1:A:52:PHE:HD2 | 1:A:66:PHE:HD2 | 12 | 0.12 |
| (1,505) | 1:A:124:GLU:HA | 1:A:124:GLU:H | 20 | 0.12 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 1 | 0.12 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 17 | 0.12 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 20 | 0.12 |
| (1,496) | 1:A:6:PHE:HA | 1:A:9:VAL:HG22 | 3 | 0.12 |
| (1,496) | 1:A:6:PHE:HA | 1:A:9:VAL:HG21 | 3 | 0.12 |
| (1,496) | 1:A:6:PHE:HA | 1:A:9:VAL:HG23 | 3 | 0.12 |
| (1,496) | 1:A:6:PHE:HA | 1:A:9:VAL:HG22 | 15 | 0.12 |
| (1,496) | 1:A:6:PHE:HA | 1:A:9:VAL:HG21 | 15 | 0.12 |
| (1,496) | 1:A:6:PHE:HA | 1:A:9:VAL:HG23 | 15 | 0.12 |
| (1,492) | 1:A:54:LEU:HA | 1:A:49:GLN:HE21 | 14 | 0.12 |
| (1,475) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:35:GLU:HA | 5 | 0.12 |
| (1,475) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:35:GLU:HA | 8 | 0.12 |
| (1,475) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:35:GLU:HA | 14 | 0.12 |
| (1,475) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:35:GLU:HA | 18 | 0.12 |
| (1,475) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:35:GLU:HA | 19 | 0.12 |
| (1,461) | 1:A:128:GLY:H | 1:A:127:SER:HA | 11 | 0.12 |
| (1,454) | 1:A:57:GLU:HA | 1:A:57:GLU:HB2 | 6 | 0.12 |
| (1,454) | 1:A:57:GLU:HA | 1:A:57:GLU:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,438) | 1:A:47:LYS:HA | 1:A:44:ARG:HA | 4 | 0.12 |
| (1,438) | 1:A:47:LYS:HA | 1:A:44:ARG:HA | 10 | 0.12 |
| (1,438) | 1:A:47:LYS:HA | 1:A:44:ARG:HA | 17 | 0.12 |
| (1,415) | 1:A:97:SER:HA | 1:A:96:PRO:HB2 | 2 | 0.12 |
| (1,415) | 1:A:97:SER:HA | 1:A:96:PRO:HB2 | 8 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,415) | 1:A:97:SER:HA | 1:A:96:PRO:HB2 | 9 | 0.12 |
| (1,415) | 1:A:97:SER:HA | 1:A:96:PRO:HB2 | 10 | 0.12 |
| (1,415) | 1:A:97:SER:HA | 1:A:96:PRO:HB2 | 20 | 0.12 |
| (1,387) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:65:ASP:HB3 | 10 | 0.12 |
| (1,383) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:HA | 13 | 0.12 |
| (1,383) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:HA | 14 | 0.12 |
| (1,370) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:98:ILE:H | 2 | 0.12 |
| (1,370) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:98:ILE:H | 20 | 0.12 |
| (1,369) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:110:SER:HB2 | 9 | 0.12 |
| (1,369) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:110:SER:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,354) | 1:A:11:SER:HB3 | 1:A:11:SER:HA | 9 | 0.12 |
| (1,354) | 1:A:11:SER:HB3 | 1:A:11:SER:HA | 14 | 0.12 |
| (1,309) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:117:ASP:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,29) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:77:ILE:HA | 19 | 0.12 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 16 | 0.12 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 16 | 0.12 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 16 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG21 | 2 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG22 | 2 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG23 | 2 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG21 | 2 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG22 | 2 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG23 | 2 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG21 | 2 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG22 | 2 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG23 | 2 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG21 | 16 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG22 | 16 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG23 | 16 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG21 | 16 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG22 | 16 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG23 | 16 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG21 | 16 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG22 | 16 | 0.12 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG23 | 16 | 0.12 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 5 | 0.12 |
| (1,250) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:102:TYR:HD2 | 17 | 0.12 |
| (1,2350) | 1:A:46:ILE:HD12 | 1:A:115:VAL:HG12 | 2 | 0.12 |
| (1,2350) | 1:A:46:ILE:HD12 | 1:A:115:VAL:HG11 | 2 | 0.12 |
| (1,2350) | 1:A:46:ILE:HD12 | 1:A:115:VAL:HG13 | 2 | 0.12 |
| (1,2350) | 1:A:46:ILE:HD11 | 1:A:115:VAL:HG12 | 2 | 0.12 |
| (1,2350) | 1:A:46:ILE:HD11 | 1:A:115:VAL:HG11 | 2 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2350) | 1:A:46:ILE:HD11 | 1:A:115:VAL:HG13 | 2 | 0.12 |
| (1,2350) | 1:A:46:ILE:HD13 | 1:A:115:VAL:HG12 | 2 | 0.12 |
| (1,2350) | 1:A:46:ILE:HD13 | 1:A:115:VAL:HG11 | 2 | 0.12 |
| (1,2350) | 1:A:46:ILE:HD13 | 1:A:115:VAL:HG13 | 2 | 0.12 |
| (1,235) | 1:A:139:PHE:HZ | 1:A:138:ILE:HG12 | 3 | 0.12 |
| (1,235) | 1:A:139:PHE:HZ | 1:A:138:ILE:HG12 | 13 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG22 | 10 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG21 | 10 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG23 | 10 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG22 | 10 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG21 | 10 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG23 | 10 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG22 | 10 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG21 | 10 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG23 | 10 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG22 | 14 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG21 | 14 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG23 | 14 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG22 | 14 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG21 | 14 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG23 | 14 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG22 | 14 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG21 | 14 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG23 | 14 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG22 | 17 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG21 | 17 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG23 | 17 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG22 | 17 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG21 | 17 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG23 | 17 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG22 | 17 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG21 | 17 | 0.12 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG23 | 17 | 0.12 |
| (1,2336) | 1:A:70:VAL:HG12 | 1:A:67:ILE:HG22 | 12 | 0.12 |
| (1,2336) | 1:A:70:VAL:HG12 | 1:A:67:ILE:HG21 | 12 | 0.12 |
| (1,2336) | 1:A:70:VAL:HG12 | 1:A:67:ILE:HG23 | 12 | 0.12 |
| (1,2336) | 1:A:70:VAL:HG11 | 1:A:67:ILE:HG22 | 12 | 0.12 |
| (1,2336) | 1:A:70:VAL:HG11 | 1:A:67:ILE:HG21 | 12 | 0.12 |
| (1,2336) | 1:A:70:VAL:HG11 | 1:A:67:ILE:HG23 | 12 | 0.12 |
| (1,2336) | 1:A:70:VAL:HG13 | 1:A:67:ILE:HG22 | 12 | 0.12 |
| (1,2336) | 1:A:70:VAL:HG13 | 1:A:67:ILE:HG21 | 12 | 0.12 |
| (1,2336) | 1:A:70:VAL:HG13 | 1:A:67:ILE:HG23 | 12 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE2 | 1 | 0.12 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE1 | 1 | 0.12 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE3 | 1 | 0.12 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE2 | 1 | 0.12 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE1 | 1 | 0.12 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE3 | 1 | 0.12 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE2 | 1 | 0.12 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE1 | 1 | 0.12 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE3 | 1 | 0.12 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG22 | 10 | 0.12 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG21 | 10 | 0.12 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG23 | 10 | 0.12 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG22 | 10 | 0.12 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG21 | 10 | 0.12 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG23 | 10 | 0.12 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG22 | 10 | 0.12 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG21 | 10 | 0.12 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG23 | 10 | 0.12 |
| (1,23) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:82:VAL:HG12 | 20 | 0.12 |
| (1,23) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:82:VAL:HG11 | 20 | 0.12 |
| (1,23) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:82:VAL:HG13 | 20 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 1 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 1 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 1 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 7 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 7 | 0.12 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 7 | 0.12 |
| (1,2273) | 1:A:115:VAL:H | 1:A:116:THR:HB | 2 | 0.12 |
| (1,2273) | 1:A:115:VAL:H | 1:A:116:THR:HB | 3 | 0.12 |
| (1,2273) | 1:A:115:VAL:H | 1:A:116:THR:HB | 6 | 0.12 |
| (1,2273) | 1:A:115:VAL:H | 1:A:116:THR:HB | 8 | 0.12 |
| (1,2273) | 1:A:115:VAL:H | 1:A:116:THR:HB | 13 | 0.12 |
| (1,2273) | 1:A:115:VAL:H | 1:A:116:THR:HB | 18 | 0.12 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 13 | 0.12 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 16 | 0.12 |
| (1,2223) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:81:LYS:HG3 | 3 | 0.12 |
| (1,2223) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:81:LYS:HG3 | 17 | 0.12 |
| (1,2223) | 1:A:78:GLU:H | 1:A:81:LYS:HG3 | 18 | 0.12 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 1 | 0.12 |
| (1,2215) | 1:A:68:THR:H | 1:A:71:ASN:HB3 | 19 | 0.12 |
| (1,2201) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:55:SER:H | 19 | 0.12 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG12 | 12 | 0.12 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG11 | 12 | 0.12 |
| (1,2186) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:42:VAL:HG13 | 12 | 0.12 |
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 12 | 0.12 |
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,2159) | 1:A:27:ALA:H | 1:A:31:GLU:HG2 | 8 | 0.12 |
| (1,2100) | 1:A:18:THR:H | 1:A:19:ASN:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG12 | 10 | 0.12 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG11 | 10 | 0.12 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG13 | 10 | 0.12 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG12 | 19 | 0.12 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG11 | 19 | 0.12 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG13 | 19 | 0.12 |
| (1,2063) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:47:LYS:HB2 | 2 | 0.12 |
| (1,2059) | 1:A:136:ASN:HD21 | 1:A:137:ASP:H | 8 | 0.12 |
| (1,2050) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,2043) | 1:A:90:THR:H | 1:A:89:ASN:HB3 | 12 | 0.12 |
| (1,2043) | 1:A:90:THR:H | 1:A:89:ASN:HB3 | 13 | 0.12 |
| (1,2043) | 1:A:90:THR:H | 1:A:89:ASN:HB3 | 15 | 0.12 |
| (1,2043) | 1:A:90:THR:H | 1:A:89:ASN:HB3 | 18 | 0.12 |
| (1,2040) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,2023) | 1:A:97:SER:H | 1:A:96:PRO:HD3 | 8 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2007) | 1:A:127:SER:H | 1:A:126:ALA:HB2 | 1 | 0.12 |
| (1,2007) | 1:A:127:SER:H | 1:A:126:ALA:HB1 | 1 | 0.12 |
| (1,2007) | 1:A:127:SER:H | 1:A:126:ALA:HB3 | 1 | 0.12 |
| (1,2005) | 1:A:127:SER:H | 1:A:126:ALA:HA | 15 | 0.12 |
| (1,20) | 1:A:75:PHE:HB2 | 1:A:75:PHE:HD2 | 4 | 0.12 |
| (1,20) | 1:A:75:PHE:HB2 | 1:A:75:PHE:HD2 | 9 | 0.12 |
| (1,20) | 1:A:75:PHE:HB2 | 1:A:75:PHE:HD2 | 12 | 0.12 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 5 | 0.12 |
| (1,1957) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:88:GLU:HB3 | 19 | 0.12 |
| (1,1924) | 1:A:85:PHE:H | 1:A:84:ASN:HB3 | 17 | 0.12 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 1 | 0.12 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 7 | 0.12 |
| (1,1920) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,1900) | 1:A:70:VAL:H | 1:A:70:VAL:HG22 | 16 | 0.12 |
| (1,1900) | 1:A:70:VAL:H | 1:A:70:VAL:HG21 | 16 | 0.12 |
| (1,1900) | 1:A:70:VAL:H | 1:A:70:VAL:HG23 | 16 | 0.12 |
| (1,1850) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 1 | 0.12 |
| (1,1850) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 2 | 0.12 |
| (1,1850) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 7 | 0.12 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 4 | 0.12 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 13 | 0.12 |
| (1,1809) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:35:GLU:HG3 | 11 | 0.12 |
| (1,1767) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:93:LEU:HB2 | 2 | 0.12 |
| (1,1767) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:93:LEU:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,1767) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:93:LEU:HB2 | 7 | 0.12 |
| (1,1767) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:93:LEU:HB2 | 19 | 0.12 |
| (1,1746) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:109:VAL:HB | 4 | 0.12 |
| (1,1746) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:109:VAL:HB | 7 | 0.12 |
| (1,1746) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:109:VAL:HB | 8 | 0.12 |
| (1,1746) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:109:VAL:HB | 16 | 0.12 |
| (1,1746) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:109:VAL:HB | 20 | 0.12 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,1722) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:49:GLN:HE21 | 18 | 0.12 |
| (1,171) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:69:LEU:HB2 | 9 | 0.12 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 17 | 0.12 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 17 | 0.12 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 17 | 0.12 |
| (1,169) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:109:VAL:HA | 14 | 0.12 |
| (1,1685) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:53:ASP:HB2 | 17 | 0.12 |
| (1,1661) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HB2 | 11 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 1 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 2 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 4 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 8 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 10 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 11 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 12 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 14 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 15 | 0.12 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1555) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:124:GLU:HB3 | 11 | 0.12 |
| (1,1554) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:123:PHE:HB2 | 11 | 0.12 |
| (1,1542) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 4 | 0.12 |
| (1,1542) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,1542) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 6 | 0.12 |
| (1,1542) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,1542) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 16 | 0.12 |
| (1,1542) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 20 | 0.12 |
| (1,1532) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:5:TYR:HB3 | 1 | 0.12 |
| (1,1528) | 1:A:143:LYS:H | 1:A:143:LYS:HB2 | 9 | 0.12 |
| (1,1519) | 1:A:135:LEU:H | 1:A:135:LEU:HB2 | 9 | 0.12 |
| (1,1420) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:144:ILE:HB | 20 | 0.12 |
| (1,1418) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:146:TRP:H | 9 | 0.12 |
| (1,141) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:66:PHE:HD1 | 3 | 0.12 |
| (1,1404) | 1:A:12:ALA:H | 1:A:11:SER:HA | 7 | 0.12 |
| (1,1404) | 1:A:12:ALA:H | 1:A:11:SER:HA | 17 | 0.12 |
| (1,1396) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:148:GLU:HB3 | 1 | 0.12 |
| (1,1396) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:148:GLU:HB3 | 10 | 0.12 |
| (1,1396) | 1:A:148:GLU:H | 1:A:148:GLU:HB3 | 19 | 0.12 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:123:PHE:H | 5 | 0.12 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:123:PHE:H | 5 | 0.12 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:123:PHE:H | 5 | 0.12 |
| (1,1376) | 1:A:118:VAL:H | 1:A:29:VAL:HG12 | 3 | 0.12 |
| (1,1376) | 1:A:118:VAL:H | 1:A:29:VAL:HG11 | 3 | 0.12 |
| (1,1376) | 1:A:118:VAL:H | 1:A:29:VAL:HG13 | 3 | 0.12 |
| (1,1363) | 1:A:120:LYS:H | 1:A:120:LYS:HG2 | 7 | 0.12 |
| (1,1363) | 1:A:120:LYS:H | 1:A:120:LYS:HG2 | 11 | 0.12 |
| (1,1363) | 1:A:120:LYS:H | 1:A:120:LYS:HG2 | 15 | 0.12 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:114:VAL:HA | 3 | 0.12 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:114:VAL:HA | 3 | 0.12 |
| (1,1358) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:114:VAL:HA | 3 | 0.12 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:123:PHE:HD2 | 13 | 0.12 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:123:PHE:HD2 | 13 | 0.12 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:123:PHE:HD2 | 13 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,134) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:108:PHE:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,134) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:108:PHE:HB3 | 10 | 0.12 |
| (1,134) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:108:PHE:HB3 | 15 | 0.12 |
| (1,1339) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:102:TYR:HD1 | 4 | 0.12 |
| (1,1339) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:102:TYR:HD1 | 4 | 0.12 |
| (1,1339) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:102:TYR:HD1 | 4 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG21 | 1 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG22 | 1 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG23 | 1 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG21 | 3 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG22 | 3 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG23 | 3 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG21 | 4 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG22 | 4 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG23 | 4 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG21 | 8 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG22 | 8 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG23 | 8 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG21 | 11 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG22 | 11 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG23 | 11 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG21 | 18 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG22 | 18 | 0.12 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG23 | 18 | 0.12 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:74:ARG:H | 1 | 0.12 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:74:ARG:H | 1 | 0.12 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:74:ARG:H | 1 | 0.12 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:74:ARG:H | 6 | 0.12 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:74:ARG:H | 6 | 0.12 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:74:ARG:H | 6 | 0.12 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:74:ARG:H | 8 | 0.12 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:74:ARG:H | 8 | 0.12 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:74:ARG:H | 8 | 0.12 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:74:ARG:H | 17 | 0.12 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:74:ARG:H | 17 | 0.12 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:74:ARG:H | 17 | 0.12 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:74:ARG:H | 20 | 0.12 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:74:ARG:H | 20 | 0.12 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:74:ARG:H | 20 | 0.12 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 7 | 0.12 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 7 | 0.12 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 7 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 17 | 0.12 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 17 | 0.12 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 17 | 0.12 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HD2 | 12 | 0.12 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HD2 | 12 | 0.12 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HD2 | 12 | 0.12 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HD2 | 14 | 0.12 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HD2 | 14 | 0.12 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HD2 | 14 | 0.12 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HD2 | 18 | 0.12 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HD2 | 18 | 0.12 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HD2 | 18 | 0.12 |
| (1,1279) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HD12 | 1 | 0.12 |
| (1,1279) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HD11 | 1 | 0.12 |
| (1,1279) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HD13 | 1 | 0.12 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD12 | 6 | 0.12 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD11 | 6 | 0.12 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD13 | 6 | 0.12 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD12 | 12 | 0.12 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD11 | 12 | 0.12 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD13 | 12 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD12 | 1:A:144:ILE:HA | 1 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD11 | 1:A:144:ILE:HA | 1 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD13 | 1:A:144:ILE:HA | 1 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD12 | 1:A:144:ILE:HA | 2 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD11 | 1:A:144:ILE:HA | 2 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD13 | 1:A:144:ILE:HA | 2 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD12 | 1:A:144:ILE:HA | 7 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD11 | 1:A:144:ILE:HA | 7 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD13 | 1:A:144:ILE:HA | 7 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD12 | 1:A:144:ILE:HA | 13 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD11 | 1:A:144:ILE:HA | 13 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD13 | 1:A:144:ILE:HA | 13 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD12 | 1:A:144:ILE:HA | 15 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD11 | 1:A:144:ILE:HA | 15 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD13 | 1:A:144:ILE:HA | 15 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD12 | 1:A:144:ILE:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD11 | 1:A:144:ILE:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD13 | 1:A:144:ILE:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD12 | 1:A:144:ILE:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD11 | 1:A:144:ILE:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD13 | 1:A:144:ILE:HA | 18 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD12 | 1:A:144:ILE:HA | 20 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD11 | 1:A:144:ILE:HA | 20 | 0.12 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD13 | 1:A:144:ILE:HA | 20 | 0.12 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD12 | 1:A:123:PHE:HE2 | 13 | 0.12 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD11 | 1:A:123:PHE:HE2 | 13 | 0.12 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD13 | 1:A:123:PHE:HE2 | 13 | 0.12 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD12 | 1:A:123:PHE:HE2 | 14 | 0.12 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD11 | 1:A:123:PHE:HE2 | 14 | 0.12 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD13 | 1:A:123:PHE:HE2 | 14 | 0.12 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD12 | 1:A:123:PHE:HE2 | 19 | 0.12 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD11 | 1:A:123:PHE:HE2 | 19 | 0.12 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD13 | 1:A:123:PHE:HE2 | 19 | 0.12 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 1 | 0.12 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 1 | 0.12 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 1 | 0.12 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 2 | 0.12 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 2 | 0.12 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 2 | 0.12 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 13 | 0.12 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 13 | 0.12 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 13 | 0.12 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 16 | 0.12 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 16 | 0.12 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 16 | 0.12 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 11 | 0.12 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 11 | 0.12 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 11 | 0.12 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 14 | 0.12 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 14 | 0.12 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 14 | 0.12 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 18 | 0.12 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 18 | 0.12 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 18 | 0.12 |
| (1,1227) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:32:LEU:HA | 10 | 0.12 |
| (1,1227) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:32:LEU:HA | 10 | 0.12 |
| (1,1227) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:32:LEU:HA | 10 | 0.12 |
| (1,1221) | 1:A:90:THR:HA | 1:A:87:ILE:HG22 | 5 | 0.12 |
| (1,1221) | 1:A:90:THR:HA | 1:A:87:ILE:HG21 | 5 | 0.12 |
| (1,1221) | 1:A:90:THR:HA | 1:A:87:ILE:HG23 | 5 | 0.12 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG22 | 5 | 0.12 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG21 | 5 | 0.12 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG23 | 5 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 1 | 0.12 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 1 | 0.12 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 1 | 0.12 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 14 | 0.12 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 14 | 0.12 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 14 | 0.12 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 14 | 0.12 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 14 | 0.12 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 14 | 0.12 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 11 | 0.12 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD11 | 11 | 0.12 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD13 | 11 | 0.12 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD12 | 11 | 0.12 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 11 | 0.12 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD13 | 11 | 0.12 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD12 | 11 | 0.12 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD11 | 11 | 0.12 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD13 | 11 | 0.12 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE2 | 17 | 0.12 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE1 | 17 | 0.12 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE3 | 17 | 0.12 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE2 | 17 | 0.12 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE1 | 17 | 0.12 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE3 | 17 | 0.12 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE2 | 17 | 0.12 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE1 | 17 | 0.12 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE3 | 17 | 0.12 |
| (1,1183) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:65:ASP:HA | 2 | 0.12 |
| (1,1183) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:65:ASP:HA | 2 | 0.12 |
| (1,1183) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:65:ASP:HA | 2 | 0.12 |
| (1,1183) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:65:ASP:HA | 10 | 0.12 |
| (1,1183) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:65:ASP:HA | 10 | 0.12 |
| (1,1183) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:65:ASP:HA | 10 | 0.12 |
| (1,116) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HB3 | 5 | 0.12 |
| (1,116) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HB3 | 12 | 0.12 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD12 | 4 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD11 | 4 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD13 | 4 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD12 | 4 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD11 | 4 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD13 | 4 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD12 | 4 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD11 | 4 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD13 | 4 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD12 | 9 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD11 | 9 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD13 | 9 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD12 | 9 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD11 | 9 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD13 | 9 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD12 | 9 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD11 | 9 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD13 | 9 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD12 | 17 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD11 | 17 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD13 | 17 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD12 | 17 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD11 | 17 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD13 | 17 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD12 | 17 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD11 | 17 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD13 | 17 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD12 | 19 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD11 | 19 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD13 | 19 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD12 | 19 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD11 | 19 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD13 | 19 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD12 | 19 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD11 | 19 | 0.12 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD13 | 19 | 0.12 |
| (1,1131) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:28:THR:HG21 | 1 | 0.12 |
| (1,1131) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:28:THR:HG22 | 1 | 0.12 |
| (1,1131) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:28:THR:HG23 | 1 | 0.12 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG22 | 20 | 0.12 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG21 | 20 | 0.12 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG23 | 20 | 0.12 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD12 | 1:A:32:LEU:HA | 14 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD11 | 1:A:32:LEU:HA | 14 | 0.12 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD13 | 1:A:32:LEU:HA | 14 | 0.12 |
| (1,1055) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 1 | 0.12 |
| (1,1055) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 11 | 0.12 |
| (1,1055) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 15 | 0.12 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:72:ASN:HD21 | 5 | 0.12 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:72:ASN:HD21 | 5 | 0.12 |
| (1,1044) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:72:ASN:HD21 | 5 | 0.12 |
| (1,104) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HA | 14 | 0.12 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 1 | 0.12 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 1 | 0.12 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 1 | 0.12 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 2 | 0.12 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 2 | 0.12 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 2 | 0.12 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 12 | 0.12 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 12 | 0.12 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 12 | 0.12 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 15 | 0.12 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 15 | 0.12 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 15 | 0.12 |
| (1,1028) | 1:A:121:ARG:H | 1:A:121:ARG:HG2 | 14 | 0.12 |
| (1,1019) | 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:105:PHE:H | 9 | 0.12 |
| (1,1019) | 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:105:PHE:H | 16 | 0.12 |
| (1,1001) | 1:A:20:LYS:HD3 | 1:A:20:LYS:HA | 2 | 0.12 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:52:PHE:HA | 11 | 0.11 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:53:ASP:HA | 11 | 0.11 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:52:PHE:HA | 14 | 0.11 |
| (2,97) | 1:A:108:PHE:HD2 | 1:A:53:ASP:HA | 14 | 0.11 |
| (2,85) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HG2 | 3 | 0.11 |
| (2,85) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:56:ARG:HG2 | 3 | 0.11 |
| (2,85) | 1:A:66:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HG2 | 17 | 0.11 |
| (2,85) | 1:A:66:PHE:HE1 | 1:A:56:ARG:HG2 | 17 | 0.11 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG22 | 17 | 0.11 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG21 | 17 | 0.11 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG23 | 17 | 0.11 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG22 | 17 | 0.11 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG21 | 17 | 0.11 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG23 | 17 | 0.11 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG22 | 18 | 0.11 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG21 | 18 | 0.11 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:70:VAL:HG23 | 18 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG22 | 18 | 0.11 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG21 | 18 | 0.11 |
| (2,78) | 1:A:105:PHE:HE2 | 1:A:70:VAL:HG23 | 18 | 0.11 |
| (2,57) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:5:TYR:HE1 | 5 | 0.11 |
| (2,57) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:5:TYR:HE1 | 5 | 0.11 |
| (2,56) | 1:A:5:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HD1 | 8 | 0.11 |
| (2,56) | 1:A:5:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HD2 | 8 | 0.11 |
| (2,56) | 1:A:5:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HD1 | 18 | 0.11 |
| (2,56) | 1:A:5:TYR:HE1 | 1:A:6:PHE:HD2 | 18 | 0.11 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 1 | 0.11 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 1 | 0.11 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 1 | 0.11 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 1 | 0.11 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 1 | 0.11 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 1 | 0.11 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 4 | 0.11 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 4 | 0.11 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 4 | 0.11 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 4 | 0.11 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 4 | 0.11 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 4 | 0.11 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD12 | 17 | 0.11 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD11 | 17 | 0.11 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:93:LEU:HD13 | 17 | 0.11 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG22 | 17 | 0.11 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG21 | 17 | 0.11 |
| (2,559) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:101:ILE:HG23 | 17 | 0.11 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 3 | 0.11 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 3 | 0.11 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 3 | 0.11 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HD12 | 3 | 0.11 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HD11 | 3 | 0.11 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:46:ILE:HD13 | 3 | 0.11 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.11 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.11 |
| (2,545) | 1:A:48:ASN:H | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.11 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG12 | 5 | 0.11 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG22 | 5 | 0.11 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG21 | 5 | 0.11 |
| (2,542) | 1:A:39:SER:H | 1:A:36:ILE:HG23 | 5 | 0.11 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HG22 | 1 | 0.11 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HG21 | 1 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HG23 | 1 | 0.11 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:118:VAL:HG22 | 1 | 0.11 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:118:VAL:HG21 | 1 | 0.11 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:118:VAL:HG23 | 1 | 0.11 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HG22 | 9 | 0.11 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HG21 | 9 | 0.11 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:33:VAL:HG23 | 9 | 0.11 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:118:VAL:HG22 | 9 | 0.11 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:118:VAL:HG21 | 9 | 0.11 |
| (2,539) | 1:A:32:LEU:H | 1:A:118:VAL:HG23 | 9 | 0.11 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG21 | 8 | 0.11 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG22 | 8 | 0.11 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG23 | 8 | 0.11 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG21 | 8 | 0.11 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG22 | 8 | 0.11 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG23 | 8 | 0.11 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG21 | 15 | 0.11 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG22 | 15 | 0.11 |
| (2,533) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:18:THR:HG23 | 15 | 0.11 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG21 | 15 | 0.11 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG22 | 15 | 0.11 |
| (2,533) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:18:THR:HG23 | 15 | 0.11 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 13 | 0.11 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 13 | 0.11 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 13 | 0.11 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 13 | 0.11 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 13 | 0.11 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 13 | 0.11 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:21:LEU:HD12 | 13 | 0.11 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:21:LEU:HD11 | 13 | 0.11 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:21:LEU:HD13 | 13 | 0.11 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 13 | 0.11 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 13 | 0.11 |
| (2,530) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 13 | 0.11 |
| (2,53) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:52:PHE:HB3 | 8 | 0.11 |
| (2,53) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HA | 8 | 0.11 |
| (2,53) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:52:PHE:HB3 | 9 | 0.11 |
| (2,53) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HA | 9 | 0.11 |
| (2,53) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:52:PHE:HB3 | 16 | 0.11 |
| (2,53) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HA | 16 | 0.11 |
| (2,523) | 1:A:130:GLY:H | 1:A:128:GLY:HA3 | 13 | 0.11 |
| (2,523) | 1:A:130:GLY:H | 1:A:128:GLY:HA2 | 13 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 6 | 0.11 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 6 | 0.11 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 6 | 0.11 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 6 | 0.11 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 6 | 0.11 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 6 | 0.11 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:32:LEU:HD12 | 6 | 0.11 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:32:LEU:HD11 | 6 | 0.11 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:32:LEU:HD13 | 6 | 0.11 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 8 | 0.11 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 8 | 0.11 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 8 | 0.11 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD22 | 8 | 0.11 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD21 | 8 | 0.11 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:17:LEU:HD23 | 8 | 0.11 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:32:LEU:HD12 | 8 | 0.11 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:32:LEU:HD11 | 8 | 0.11 |
| (2,520) | 1:A:18:THR:H | 1:A:32:LEU:HD13 | 8 | 0.11 |
| (2,507) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:94:ASN:HB2 | 1 | 0.11 |
| (2,507) | 1:A:94:ASN:HD22 | 1:A:94:ASN:HB3 | 1 | 0.11 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:92:CYS:HB2 | 9 | 0.11 |
| (2,490) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:91:ASN:HB2 | 9 | 0.11 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 8 | 0.11 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 8 | 0.11 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 8 | 0.11 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 8 | 0.11 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD1 | 1:A:105:PHE:HB3 | 14 | 0.11 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD2 | 1:A:86:ASN:HB3 | 14 | 0.11 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD2 | 1:A:86:ASN:HB2 | 14 | 0.11 |
| (2,49) | 1:A:85:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HB3 | 14 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 1 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 1 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 1 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD12 | 1 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD11 | 1 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD13 | 1 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 2 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 2 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 2 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD12 | 2 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD11 | 2 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD13 | 2 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD12 | 9 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD11 | 9 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD13 | 9 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD12 | 18 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD11 | 18 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:17:LEU:HD13 | 18 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD12 | 18 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD11 | 18 | 0.11 |
| (2,479) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:111:ILE:HD13 | 18 | 0.11 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB2 | 5 | 0.11 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB3 | 5 | 0.11 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB2 | 8 | 0.11 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB3 | 8 | 0.11 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB2 | 10 | 0.11 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB3 | 10 | 0.11 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB2 | 14 | 0.11 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB3 | 14 | 0.11 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB2 | 18 | 0.11 |
| (2,473) | 1:A:38:LYS:H | 1:A:39:SER:HB3 | 18 | 0.11 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD12 | 17 | 0.11 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD11 | 17 | 0.11 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD13 | 17 | 0.11 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD22 | 17 | 0.11 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD21 | 17 | 0.11 |
| (2,429) | 1:A:15:LYS:H | 1:A:14:LEU:HD23 | 17 | 0.11 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HG3 | 13 | 0.11 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HG2 | 13 | 0.11 |
| (2,423) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:23:ILE:HG12 | 13 | 0.11 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HA | 2 | 0.11 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:18:THR:HB | 2 | 0.11 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:15:LYS:HA | 19 | 0.11 |
| (2,421) | 1:A:19:ASN:H | 1:A:18:THR:HB | 19 | 0.11 |
| (2,410) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:81:LYS:HB2 | 1 | 0.11 |
| (2,410) | 1:A:113:ASN:H | 1:A:111:ILE:HB | 1 | 0.11 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB3 | 15 | 0.11 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB3 | 15 | 0.11 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB3 | 15 | 0.11 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB2 | 15 | 0.11 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB2 | 15 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB2 | 15 | 0.11 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB3 | 18 | 0.11 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB3 | 18 | 0.11 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB3 | 18 | 0.11 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG21 | 1:A:120:LYS:HB2 | 18 | 0.11 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG22 | 1:A:120:LYS:HB2 | 18 | 0.11 |
| (2,356) | 1:A:116:THR:HG23 | 1:A:120:LYS:HB2 | 18 | 0.11 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:100:THR:HB | 15 | 0.11 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:100:THR:HB | 15 | 0.11 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:100:THR:HB | 15 | 0.11 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD12 | 1:A:65:ASP:HA | 15 | 0.11 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD11 | 1:A:65:ASP:HA | 15 | 0.11 |
| (2,349) | 1:A:101:ILE:HD13 | 1:A:65:ASP:HA | 15 | 0.11 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:92:CYS:HB3 | 6 | 0.11 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:92:CYS:HB3 | 6 | 0.11 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:92:CYS:HB3 | 6 | 0.11 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HB2 | 6 | 0.11 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HB2 | 6 | 0.11 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HB2 | 6 | 0.11 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:92:CYS:HB3 | 15 | 0.11 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:92:CYS:HB3 | 15 | 0.11 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:92:CYS:HB3 | 15 | 0.11 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HB2 | 15 | 0.11 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HB2 | 15 | 0.11 |
| (2,347) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HB2 | 15 | 0.11 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 18 | 0.11 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 18 | 0.11 |
| (2,335) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 18 | 0.11 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG22 | 18 | 0.11 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG21 | 18 | 0.11 |
| (2,335) | 1:A:98:ILE:H | 1:A:98:ILE:HG23 | 18 | 0.11 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:85:PHE:HE1 | 10 | 0.11 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:85:PHE:HE1 | 10 | 0.11 |
| (2,326) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:85:PHE:HE1 | 10 | 0.11 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG22 | 10 | 0.11 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG21 | 10 | 0.11 |
| (2,326) | 1:A:113:ASN:HD22 | 1:A:109:VAL:HG23 | 10 | 0.11 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:26:CYS:H | 9 | 0.11 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:26:CYS:H | 9 | 0.11 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:26:CYS:H | 9 | 0.11 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:33:VAL:H | 9 | 0.11 |
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:33:VAL:H | 9 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,316) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:33:VAL:H | 9 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:H | 12 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:H | 12 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:H | 12 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:32:LEU:H | 12 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:32:LEU:H | 12 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:32:LEU:H | 12 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:H | 13 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:H | 13 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:H | 13 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:32:LEU:H | 13 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:32:LEU:H | 13 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:32:LEU:H | 13 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:H | 15 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:H | 15 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:H | 15 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:32:LEU:H | 15 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:32:LEU:H | 15 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:32:LEU:H | 15 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:H | 16 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:H | 16 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:H | 16 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:32:LEU:H | 16 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:32:LEU:H | 16 | 0.11 |
| (2,313) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:32:LEU:H | 16 | 0.11 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 1 | 0.11 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 1 | 0.11 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 1 | 0.11 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:119:LYS:H | 1 | 0.11 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:119:LYS:H | 1 | 0.11 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:119:LYS:H | 1 | 0.11 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 9 | 0.11 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 9 | 0.11 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 9 | 0.11 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:119:LYS:H | 9 | 0.11 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:119:LYS:H | 9 | 0.11 |
| (2,310) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:119:LYS:H | 9 | 0.11 |
| (2,305) | 1:A:20:LYS:HD3 | 1:A:20:LYS:HB2 | 1 | 0.11 |
| (2,305) | 1:A:20:LYS:HD3 | 1:A:20:LYS:HB3 | 1 | 0.11 |
| (2,296) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:120:LYS:HG2 | 18 | 0.11 |
| (2,296) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:126:ALA:HB2 | 18 | 0.11 |
| (2,296) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:126:ALA:HB1 | 18 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,296) | 1:A:124:GLU:HB2 | 1:A:126:ALA:HB3 | 18 | 0.11 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD12 | 14 | 0.11 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD11 | 14 | 0.11 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:17:LEU:HD13 | 14 | 0.11 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.11 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.11 |
| (2,295) | 1:A:57:GLU:HB3 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.11 |
| (2,260) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:87:ILE:HA | 9 | 0.11 |
| (2,260) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HA | 9 | 0.11 |
| (2,260) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:87:ILE:HA | 12 | 0.11 |
| (2,260) | 1:A:88:GLU:HG3 | 1:A:88:GLU:HA | 12 | 0.11 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 5 | 0.11 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 5 | 0.11 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:143:LYS:HA | 16 | 0.11 |
| (2,248) | 1:A:144:ILE:HB | 1:A:145:GLU:HA | 16 | 0.11 |
| (2,244) | 1:A:95:ASN:HB3 | 1:A:93:LEU:HA | 19 | 0.11 |
| (2,244) | 1:A:95:ASN:HB3 | 1:A:97:SER:HB3 | 19 | 0.11 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB2 | 2 | 0.11 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA2 | 1:A:4:LYS:HB3 | 2 | 0.11 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB2 | 2 | 0.11 |
| (2,223) | 1:A:3:GLY:HA3 | 1:A:4:LYS:HB3 | 2 | 0.11 |
| (2,219) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:16:GLN:HG2 | 2 | 0.11 |
| (2,219) | 1:A:13:GLY:HA3 | 1:A:16:GLN:HG3 | 2 | 0.11 |
| (2,213) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:128:GLY:HA3 | 3 | 0.11 |
| (2,213) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:128:GLY:HA2 | 3 | 0.11 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD2 | 1:A:108:PHE:HD2 | 13 | 0.11 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HD1 | 13 | 0.11 |
| (2,21) | 1:A:52:PHE:HD1 | 1:A:108:PHE:HD2 | 13 | 0.11 |
| (2,201) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HB2 | 1 | 0.11 |
| (2,201) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HB3 | 1 | 0.11 |
| (2,198) | 1:A:123:PHE:HA | 1:A:123:PHE:HD1 | 10 | 0.11 |
| (2,198) | 1:A:123:PHE:HA | 1:A:123:PHE:HD2 | 10 | 0.11 |
| (2,198) | 1:A:123:PHE:HA | 1:A:123:PHE:HD1 | 13 | 0.11 |
| (2,198) | 1:A:123:PHE:HA | 1:A:123:PHE:HD2 | 13 | 0.11 |
| (2,198) | 1:A:123:PHE:HA | 1:A:123:PHE:HD1 | 14 | 0.11 |
| (2,198) | 1:A:123:PHE:HA | 1:A:123:PHE:HD2 | 14 | 0.11 |
| (2,198) | 1:A:123:PHE:HA | 1:A:123:PHE:HD1 | 16 | 0.11 |
| (2,198) | 1:A:123:PHE:HA | 1:A:123:PHE:HD2 | 16 | 0.11 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD22 | 11 | 0.11 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD21 | 11 | 0.11 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD23 | 11 | 0.11 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 11 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 11 | 0.11 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 11 | 0.11 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 11 | 0.11 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 11 | 0.11 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 11 | 0.11 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD22 | 17 | 0.11 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD21 | 17 | 0.11 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:17:LEU:HD23 | 17 | 0.11 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 17 | 0.11 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 17 | 0.11 |
| (2,185) | 1:A:15:LYS:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 17 | 0.11 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD12 | 17 | 0.11 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD11 | 17 | 0.11 |
| (2,185) | 1:A:107:GLN:HA | 1:A:59:LEU:HD13 | 17 | 0.11 |
| (2,164) | 1:A:131:SER:HB3 | 1:A:131:SER:H | 10 | 0.11 |
| (2,164) | 1:A:127:SER:H | 1:A:127:SER:HB3 | 10 | 0.11 |
| (2,159) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:43:LYS:HG2 | 3 | 0.11 |
| (2,159) | 1:A:41:THR:HA | 1:A:44:ARG:HG2 | 3 | 0.11 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:113:ASN:HA | 14 | 0.11 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:117:ASP:HA | 14 | 0.11 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:113:ASN:HA | 18 | 0.11 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:117:ASP:HA | 18 | 0.11 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:113:ASN:HA | 19 | 0.11 |
| (2,155) | 1:A:114:VAL:HA | 1:A:117:ASP:HA | 19 | 0.11 |
| (2,14) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:3:GLY:HA3 | 8 | 0.11 |
| (2,14) | 1:A:6:PHE:HD1 | 1:A:3:GLY:HA2 | 8 | 0.11 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:135:LEU:HD22 | 3 | 0.11 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:135:LEU:HD21 | 3 | 0.11 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:135:LEU:HD23 | 3 | 0.11 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:135:LEU:HD22 | 3 | 0.11 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:135:LEU:HD21 | 3 | 0.11 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:135:LEU:HD23 | 3 | 0.11 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:135:LEU:HD22 | 19 | 0.11 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:135:LEU:HD21 | 19 | 0.11 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:135:LEU:HD23 | 19 | 0.11 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:135:LEU:HD22 | 19 | 0.11 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:135:LEU:HD21 | 19 | 0.11 |
| (2,134) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:135:LEU:HD23 | 19 | 0.11 |
| (2,125) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:56:ARG:HA | 17 | 0.11 |
| (2,125) | 1:A:66:PHE:HD2 | 1:A:56:ARG:HA | 17 | 0.11 |
| (2,124) | 1:A:139:PHE:HD1 | 1:A:138:ILE:HB | 7 | 0.11 |
| (2,124) | 1:A:139:PHE:HD2 | 1:A:138:ILE:HB | 7 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD22 | 4 | 0.11 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD21 | 4 | 0.11 |
| (1,972) | 1:A:107:GLN:HB3 | 1:A:59:LEU:HD23 | 4 | 0.11 |
| (1,952) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HG12 | 16 | 0.11 |
| (1,949) | 1:A:87:ILE:HG12 | 1:A:73:MET:HA | 18 | 0.11 |
| (1,949) | 1:A:87:ILE:HG12 | 1:A:73:MET:HA | 20 | 0.11 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,925) | 1:A:104:ASN:H | 1:A:103:ARG:HB3 | 19 | 0.11 |
| (1,869) | 1:A:47:LYS:HB3 | 1:A:123:PHE:HZ | 15 | 0.11 |
| (1,813) | 1:A:88:GLU:HG2 | 1:A:73:MET:HA | 2 | 0.11 |
| (1,813) | 1:A:88:GLU:HG2 | 1:A:73:MET:HA | 11 | 0.11 |
| (1,813) | 1:A:88:GLU:HG2 | 1:A:73:MET:HA | 18 | 0.11 |
| (1,806) | 1:A:145:GLU:HG2 | 1:A:145:GLU:H | 11 | 0.11 |
| (1,797) | 1:A:78:GLU:HG2 | 1:A:78:GLU:HA | 18 | 0.11 |
| (1,790) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:99:GLU:H | 18 | 0.11 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD22 | 2 | 0.11 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD21 | 2 | 0.11 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD23 | 2 | 0.11 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD22 | 5 | 0.11 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD21 | 5 | 0.11 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD23 | 5 | 0.11 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD22 | 11 | 0.11 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD21 | 11 | 0.11 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD23 | 11 | 0.11 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD22 | 16 | 0.11 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD21 | 16 | 0.11 |
| (1,789) | 1:A:99:GLU:HG2 | 1:A:93:LEU:HD23 | 16 | 0.11 |
| (1,740) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:19:ASN:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,740) | 1:A:16:GLN:HA | 1:A:19:ASN:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,74) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:113:ASN:HA | 4 | 0.11 |
| (1,74) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:113:ASN:HA | 7 | 0.11 |
| (1,74) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:113:ASN:HA | 11 | 0.11 |
| (1,74) | 1:A:112:PHE:HD2 | 1:A:113:ASN:HA | 20 | 0.11 |
| (1,731) | 1:A:136:ASN:HB2 | 1:A:136:ASN:HA | 3 | 0.11 |
| (1,715) | 1:A:24:ASN:HB3 | 1:A:23:ILE:HB | 18 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:22:ASP:H | 1:A:22:ASP:HB3 | 7 | 0.11 |
| (1,678) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,656) | 1:A:53:ASP:HB3 | 1:A:53:ASP:H | 14 | 0.11 |
| (1,600) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:14:LEU:HD12 | 12 | 0.11 |
| (1,600) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:14:LEU:HD11 | 12 | 0.11 |
| (1,600) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:14:LEU:HD13 | 12 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG21 | 19 | 0.11 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG22 | 19 | 0.11 |
| (1,599) | 1:A:27:ALA:HA | 1:A:28:THR:HG23 | 19 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:83:VAL:H | 8 | 0.11 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG22 | 13 | 0.11 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG21 | 13 | 0.11 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG23 | 13 | 0.11 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG22 | 14 | 0.11 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG21 | 14 | 0.11 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG23 | 14 | 0.11 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG22 | 15 | 0.11 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG21 | 15 | 0.11 |
| (1,594) | 1:A:86:ASN:HA | 1:A:87:ILE:HG23 | 15 | 0.11 |
| (1,591) | 1:A:141:ALA:HA | 1:A:142:GLN:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,591) | 1:A:141:ALA:HA | 1:A:142:GLN:HB2 | 15 | 0.11 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD12 | 4 | 0.11 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD11 | 4 | 0.11 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD13 | 4 | 0.11 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD12 | 6 | 0.11 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD11 | 6 | 0.11 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD13 | 6 | 0.11 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD12 | 15 | 0.11 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD11 | 15 | 0.11 |
| (1,571) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:135:LEU:HD13 | 15 | 0.11 |
| (1,570) | 1:A:136:ASN:HA | 1:A:137:ASP:H | 20 | 0.11 |
| (1,564) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HG | 6 | 0.11 |
| (1,564) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HG | 8 | 0.11 |
| (1,564) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HG | 11 | 0.11 |
| (1,564) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HG | 12 | 0.11 |
| (1,564) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HG | 15 | 0.11 |
| (1,564) | 1:A:59:LEU:HA | 1:A:59:LEU:HG | 20 | 0.11 |
| (1,552) | 1:A:137:ASP:HA | 1:A:138:ILE:HA | 5 | 0.11 |
| (1,552) | 1:A:137:ASP:HA | 1:A:138:ILE:HA | 7 | 0.11 |
| (1,545) | 1:A:81:LYS:HA | 1:A:81:LYS:HG3 | 5 | 0.11 |
| (1,520) | 1:A:4:LYS:HA | 1:A:4:LYS:HG2 | 15 | 0.11 |
| (1,51) | 1:A:52:PHE:HD2 | 1:A:66:PHE:HD2 | 7 | 0.11 |
| (1,51) | 1:A:52:PHE:HD2 | 1:A:66:PHE:HD2 | 14 | 0.11 |
| (1,51) | 1:A:52:PHE:HD2 | 1:A:66:PHE:HD2 | 15 | 0.11 |
| (1,505) | 1:A:124:GLU:HA | 1:A:124:GLU:H | 17 | 0.11 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,500) | 1:A:117:ASP:HA | 1:A:117:ASP:HB3 | 19 | 0.11 |
| (1,48) | 1:A:146:TRP:HD1 | 1:A:147:HIS:HA | 1 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,47) | 1:A:75:PHE:HZ | 1:A:73:MET:HB3 | 19 | 0.11 |
| (1,461) | 1:A:128:GLY:H | 1:A:127:SER:HA | 4 | 0.11 |
| (1,454) | 1:A:57:GLU:HA | 1:A:57:GLU:HB2 | 4 | 0.11 |
| (1,454) | 1:A:57:GLU:HA | 1:A:57:GLU:HB2 | 13 | 0.11 |
| (1,415) | 1:A:97:SER:HA | 1:A:96:PRO:HB2 | 13 | 0.11 |
| (1,415) | 1:A:97:SER:HA | 1:A:96:PRO:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,387) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:65:ASP:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,387) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:65:ASP:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,383) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:HA | 2 | 0.11 |
| (1,383) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:HA | 3 | 0.11 |
| (1,383) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:HA | 8 | 0.11 |
| (1,383) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:HA | 9 | 0.11 |
| (1,383) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:HA | 10 | 0.11 |
| (1,383) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:HA | 11 | 0.11 |
| (1,383) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:HA | 15 | 0.11 |
| (1,383) | 1:A:97:SER:HB3 | 1:A:97:SER:HA | 18 | 0.11 |
| (1,370) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:98:ILE:H | 9 | 0.11 |
| (1,370) | 1:A:97:SER:HB2 | 1:A:98:ILE:H | 18 | 0.11 |
| (1,369) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:110:SER:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,369) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:110:SER:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,369) | 1:A:111:ILE:H | 1:A:110:SER:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,355) | 1:A:110:SER:HB3 | 1:A:111:ILE:HG12 | 2 | 0.11 |
| (1,355) | 1:A:110:SER:HB3 | 1:A:111:ILE:HG12 | 18 | 0.11 |
| (1,333) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:101:ILE:HD12 | 4 | 0.11 |
| (1,333) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:101:ILE:HD11 | 4 | 0.11 |
| (1,333) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:101:ILE:HD13 | 4 | 0.11 |
| (1,333) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:101:ILE:HD12 | 9 | 0.11 |
| (1,333) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:101:ILE:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,333) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:101:ILE:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,333) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:101:ILE:HD12 | 14 | 0.11 |
| (1,333) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:101:ILE:HD11 | 14 | 0.11 |
| (1,333) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:101:ILE:HD13 | 14 | 0.11 |
| (1,333) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:101:ILE:HD12 | 17 | 0.11 |
| (1,333) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:101:ILE:HD11 | 17 | 0.11 |
| (1,333) | 1:A:101:ILE:HA | 1:A:101:ILE:HD13 | 17 | 0.11 |
| (1,31) | 1:A:123:PHE:HZ | 1:A:43:LYS:HG2 | 15 | 0.11 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD12 | 19 | 0.11 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD11 | 19 | 0.11 |
| (1,280) | 1:A:90:THR:HB | 1:A:87:ILE:HD13 | 19 | 0.11 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG21 | 7 | 0.11 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG22 | 7 | 0.11 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG22 | 1:A:41:THR:HG23 | 7 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG21 | 7 | 0.11 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG22 | 7 | 0.11 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG21 | 1:A:41:THR:HG23 | 7 | 0.11 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG21 | 7 | 0.11 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG22 | 7 | 0.11 |
| (1,270) | 1:A:42:VAL:HG23 | 1:A:41:THR:HG23 | 7 | 0.11 |
| (1,251) | 1:A:75:PHE:HD2 | 1:A:105:PHE:HE1 | 9 | 0.11 |
| (1,250) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:102:TYR:HD2 | 1 | 0.11 |
| (1,250) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:102:TYR:HD2 | 8 | 0.11 |
| (1,250) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:102:TYR:HD2 | 15 | 0.11 |
| (1,250) | 1:A:85:PHE:HE2 | 1:A:102:TYR:HD2 | 20 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG22 | 13 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG21 | 13 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG23 | 13 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG22 | 13 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG21 | 13 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG23 | 13 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG22 | 13 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG21 | 13 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG23 | 13 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG22 | 16 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG21 | 16 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG23 | 16 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG22 | 16 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG21 | 16 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG23 | 16 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG22 | 16 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG21 | 16 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG23 | 16 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG22 | 20 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG21 | 20 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG22 | 1:A:82:VAL:HG23 | 20 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG22 | 20 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG21 | 20 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG21 | 1:A:82:VAL:HG23 | 20 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG22 | 20 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG21 | 20 | 0.11 |
| (1,2339) | 1:A:109:VAL:HG23 | 1:A:82:VAL:HG23 | 20 | 0.11 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE2 | 4 | 0.11 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE1 | 4 | 0.11 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE3 | 4 | 0.11 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE2 | 4 | 0.11 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE1 | 4 | 0.11 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE3 | 4 | 0.11 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE2 | 4 | 0.11 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE1 | 4 | 0.11 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE3 | 4 | 0.11 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE2 | 17 | 0.11 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE1 | 17 | 0.11 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD12 | 1:A:73:MET:HE3 | 17 | 0.11 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE2 | 17 | 0.11 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE1 | 17 | 0.11 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD11 | 1:A:73:MET:HE3 | 17 | 0.11 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE2 | 17 | 0.11 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE1 | 17 | 0.11 |
| (1,2335) | 1:A:69:LEU:HD13 | 1:A:73:MET:HE3 | 17 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:46:ILE:HD12 | 6 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:46:ILE:HD11 | 6 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:46:ILE:HD13 | 6 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:46:ILE:HD12 | 6 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:46:ILE:HD11 | 6 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:46:ILE:HD13 | 6 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:46:ILE:HD12 | 6 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:46:ILE:HD11 | 6 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:46:ILE:HD13 | 6 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:46:ILE:HD12 | 19 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:46:ILE:HD11 | 19 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:46:ILE:HD13 | 19 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:46:ILE:HD12 | 19 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:46:ILE:HD11 | 19 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:46:ILE:HD13 | 19 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:46:ILE:HD12 | 19 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:46:ILE:HD11 | 19 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:46:ILE:HD13 | 19 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:46:ILE:HD12 | 20 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:46:ILE:HD11 | 20 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG12 | 1:A:46:ILE:HD13 | 20 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:46:ILE:HD12 | 20 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:46:ILE:HD11 | 20 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG11 | 1:A:46:ILE:HD13 | 20 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:46:ILE:HD12 | 20 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:46:ILE:HD11 | 20 | 0.11 |
| (1,2324) | 1:A:42:VAL:HG13 | 1:A:46:ILE:HD13 | 20 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG22 | 2 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG21 | 2 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG23 | 2 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG22 | 2 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG21 | 2 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG23 | 2 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG22 | 2 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG21 | 2 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG23 | 2 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG22 | 12 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG21 | 12 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG12 | 1:A:115:VAL:HG23 | 12 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG22 | 12 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG21 | 12 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG11 | 1:A:115:VAL:HG23 | 12 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG22 | 12 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG21 | 12 | 0.11 |
| (1,2306) | 1:A:114:VAL:HG13 | 1:A:115:VAL:HG23 | 12 | 0.11 |
| (1,2292) | 1:A:115:VAL:HG12 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.11 |
| (1,2292) | 1:A:115:VAL:HG12 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.11 |
| (1,2292) | 1:A:115:VAL:HG12 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.11 |
| (1,2292) | 1:A:115:VAL:HG11 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.11 |
| (1,2292) | 1:A:115:VAL:HG11 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.11 |
| (1,2292) | 1:A:115:VAL:HG11 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.11 |
| (1,2292) | 1:A:115:VAL:HG13 | 1:A:54:LEU:HD22 | 14 | 0.11 |
| (1,2292) | 1:A:115:VAL:HG13 | 1:A:54:LEU:HD21 | 14 | 0.11 |
| (1,2292) | 1:A:115:VAL:HG13 | 1:A:54:LEU:HD23 | 14 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 3 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 3 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 3 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 12 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 12 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 12 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD22 | 16 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD21 | 16 | 0.11 |
| (1,2290) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:54:LEU:HD23 | 16 | 0.11 |
| (1,2273) | 1:A:115:VAL:H | 1:A:116:THR:HB | 15 | 0.11 |
| (1,2242) | 1:A:89:ASN:H | 1:A:87:ILE:HB | 19 | 0.11 |
| (1,2234) | 1:A:86:ASN:H | 1:A:73:MET:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,2196) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:49:GLN:HG3 | 18 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2171) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:34:ASP:HB2 | 8 | 0.11 |
| (1,216) | 1:A:104:ASN:HA | 1:A:107:GLN:HG2 | 13 | 0.11 |
| (1,2138) | 1:A:28:THR:H | 1:A:31:GLU:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,2138) | 1:A:28:THR:H | 1:A:31:GLU:HB2 | 10 | 0.11 |
| (1,2138) | 1:A:28:THR:H | 1:A:31:GLU:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,2138) | 1:A:28:THR:H | 1:A:31:GLU:HB2 | 12 | 0.11 |
| (1,2138) | 1:A:28:THR:H | 1:A:31:GLU:HB2 | 18 | 0.11 |
| (1,2111) | 1:A:135:LEU:H | 1:A:134:GLY:H | 20 | 0.11 |
| (1,2084) | 1:A:19:ASN:HD22 | 1:A:19:ASN:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG12 | 7 | 0.11 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG11 | 7 | 0.11 |
| (1,2077) | 1:A:84:ASN:HD21 | 1:A:83:VAL:HG13 | 7 | 0.11 |
| (1,2059) | 1:A:136:ASN:HD21 | 1:A:137:ASP:H | 3 | 0.11 |
| (1,2043) | 1:A:90:THR:H | 1:A:89:ASN:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,2040) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB2 | 8 | 0.11 |
| (1,2040) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB2 | 13 | 0.11 |
| (1,2040) | 1:A:91:ASN:HD22 | 1:A:91:ASN:HB2 | 18 | 0.11 |
| (1,2005) | 1:A:127:SER:H | 1:A:126:ALA:HA | 11 | 0.11 |
| (1,20) | 1:A:75:PHE:HB2 | 1:A:75:PHE:HD2 | 20 | 0.11 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG22 | 1 | 0.11 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG21 | 1 | 0.11 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG23 | 1 | 0.11 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG22 | 12 | 0.11 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG21 | 12 | 0.11 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG23 | 12 | 0.11 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG22 | 13 | 0.11 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG21 | 13 | 0.11 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG23 | 13 | 0.11 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG22 | 14 | 0.11 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG21 | 14 | 0.11 |
| (1,1998) | 1:A:55:SER:H | 1:A:111:ILE:HG23 | 14 | 0.11 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD22 | 6 | 0.11 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD21 | 6 | 0.11 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD23 | 6 | 0.11 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD22 | 16 | 0.11 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD21 | 16 | 0.11 |
| (1,1962) | 1:A:123:PHE:H | 1:A:122:LEU:HD23 | 16 | 0.11 |
| (1,1946) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,1946) | 1:A:94:ASN:H | 1:A:93:LEU:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,1909) | 1:A:58:CYS:H | 1:A:57:GLU:HB2 | 14 | 0.11 |
| (1,1900) | 1:A:70:VAL:H | 1:A:70:VAL:HG22 | 2 | 0.11 |
| (1,1900) | 1:A:70:VAL:H | 1:A:70:VAL:HG21 | 2 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1900) | 1:A:70:VAL:H | 1:A:70:VAL:HG23 | 2 | 0.11 |
| (1,1900) | 1:A:70:VAL:H | 1:A:70:VAL:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,1900) | 1:A:70:VAL:H | 1:A:70:VAL:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,1900) | 1:A:70:VAL:H | 1:A:70:VAL:HG23 | 3 | 0.11 |
| (1,1900) | 1:A:70:VAL:H | 1:A:70:VAL:HG22 | 12 | 0.11 |
| (1,1900) | 1:A:70:VAL:H | 1:A:70:VAL:HG21 | 12 | 0.11 |
| (1,1900) | 1:A:70:VAL:H | 1:A:70:VAL:HG23 | 12 | 0.11 |
| (1,1865) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HG3 | 16 | 0.11 |
| (1,1864) | 1:A:25:GLU:H | 1:A:25:GLU:HG2 | 2 | 0.11 |
| (1,1850) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,1850) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:59:LEU:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 15 | 0.11 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,1826) | 1:A:103:ARG:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 19 | 0.11 |
| (1,1809) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:35:GLU:HG3 | 1 | 0.11 |
| (1,1809) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:35:GLU:HG3 | 2 | 0.11 |
| (1,1809) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:35:GLU:HG3 | 18 | 0.11 |
| (1,1777) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 2 | 0.11 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 2 | 0.11 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 2 | 0.11 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD12 | 9 | 0.11 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,1775) | 1:A:95:ASN:H | 1:A:98:ILE:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,1746) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:109:VAL:HB | 6 | 0.11 |
| (1,1746) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:109:VAL:HB | 13 | 0.11 |
| (1,1746) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:109:VAL:HB | 15 | 0.11 |
| (1,1746) | 1:A:109:VAL:H | 1:A:109:VAL:HB | 19 | 0.11 |
| (1,1740) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HB3 | 7 | 0.11 |
| (1,1740) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,1740) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HB3 | 10 | 0.11 |
| (1,1740) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:57:GLU:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,1736) | 1:A:33:VAL:H | 1:A:32:LEU:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,1700) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:67:ILE:HB | 4 | 0.11 |
| (1,1700) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:67:ILE:HB | 10 | 0.11 |
| (1,1700) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:67:ILE:HB | 16 | 0.11 |
| (1,1700) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:67:ILE:HB | 17 | 0.11 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB1 | 16 | 0.11 |
| (1,1691) | 1:A:66:PHE:H | 1:A:64:ALA:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,169) | 1:A:105:PHE:HE1 | 1:A:109:VAL:HA | 18 | 0.11 |
| (1,1685) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:53:ASP:HB2 | 1 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1685) | 1:A:54:LEU:H | 1:A:53:ASP:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,1662) | 1:A:45:LYS:H | 1:A:45:LYS:HG3 | 15 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 9 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:56:ARG:H | 1:A:55:SER:HA | 20 | 0.11 |
| (1,161) | 1:A:93:LEU:HD22 | 1:A:102:TYR:HE1 | 2 | 0.11 |
| (1,161) | 1:A:93:LEU:HD21 | 1:A:102:TYR:HE1 | 2 | 0.11 |
| (1,161) | 1:A:93:LEU:HD23 | 1:A:102:TYR:HE1 | 2 | 0.11 |
| (1,1578) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:138:ILE:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,1578) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:138:ILE:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,1578) | 1:A:139:PHE:H | 1:A:138:ILE:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,1562) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:9:VAL:HA | 9 | 0.11 |
| (1,1562) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:9:VAL:HA | 11 | 0.11 |
| (1,1562) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:9:VAL:HA | 16 | 0.11 |
| (1,1562) | 1:A:9:VAL:H | 1:A:9:VAL:HA | 20 | 0.11 |
| (1,1554) | 1:A:124:GLU:H | 1:A:123:PHE:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,1542) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,1542) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,1542) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,1542) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,1542) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:102:TYR:HB2 | 19 | 0.11 |
| (1,1531) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 11 | 0.11 |
| (1,1531) | 1:A:6:PHE:H | 1:A:6:PHE:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,1455) | 1:A:141:ALA:H | 1:A:140:GLU:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,1452) | 1:A:146:TRP:H | 1:A:145:GLU:HA | 2 | 0.11 |
| (1,1450) | 1:A:146:TRP:H | 1:A:147:HIS:H | 10 | 0.11 |
| (1,1450) | 1:A:146:TRP:H | 1:A:147:HIS:H | 16 | 0.11 |
| (1,1420) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:144:ILE:HB | 11 | 0.11 |
| (1,1420) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:144:ILE:HB | 12 | 0.11 |
| (1,1418) | 1:A:145:GLU:H | 1:A:146:TRP:H | 13 | 0.11 |
| (1,141) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:66:PHE:HD1 | 6 | 0.11 |
| (1,141) | 1:A:61:TYR:HE1 | 1:A:66:PHE:HD1 | 10 | 0.11 |
| (1,1404) | 1:A:12:ALA:H | 1:A:11:SER:HA | 8 | 0.11 |
| (1,1404) | 1:A:12:ALA:H | 1:A:11:SER:HA | 14 | 0.11 |
| (1,1381) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:23:ILE:HD12 | 20 | 0.11 |
| (1,1381) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:23:ILE:HD11 | 20 | 0.11 |
| (1,1381) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:23:ILE:HD13 | 20 | 0.11 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:123:PHE:H | 10 | 0.11 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:123:PHE:H | 10 | 0.11 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:123:PHE:H | 10 | 0.11 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD12 | 1:A:123:PHE:H | 14 | 0.11 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD11 | 1:A:123:PHE:H | 14 | 0.11 |
| (1,1380) | 1:A:122:LEU:HD13 | 1:A:123:PHE:H | 14 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1376) | 1:A:118:VAL:H | 1:A:29:VAL:HG12 | 8 | 0.11 |
| (1,1376) | 1:A:118:VAL:H | 1:A:29:VAL:HG11 | 8 | 0.11 |
| (1,1376) | 1:A:118:VAL:H | 1:A:29:VAL:HG13 | 8 | 0.11 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG12 | 1:A:123:PHE:HD2 | 20 | 0.11 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG11 | 1:A:123:PHE:HD2 | 20 | 0.11 |
| (1,1346) | 1:A:118:VAL:HG13 | 1:A:123:PHE:HD2 | 20 | 0.11 |
| (1,134) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:108:PHE:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,134) | 1:A:61:TYR:HD1 | 1:A:108:PHE:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD12 | 1:A:99:GLU:HA | 10 | 0.11 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD11 | 1:A:99:GLU:HA | 10 | 0.11 |
| (1,1338) | 1:A:93:LEU:HD13 | 1:A:99:GLU:HA | 10 | 0.11 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG21 | 5 | 0.11 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG22 | 5 | 0.11 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG23 | 5 | 0.11 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG21 | 19 | 0.11 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG22 | 19 | 0.11 |
| (1,1332) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:100:THR:HG23 | 19 | 0.11 |
| (1,1330) | 1:A:29:VAL:HG22 | 1:A:117:ASP:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,1330) | 1:A:29:VAL:HG21 | 1:A:117:ASP:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,1330) | 1:A:29:VAL:HG23 | 1:A:117:ASP:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG22 | 1:A:47:LYS:HA | 7 | 0.11 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG21 | 1:A:47:LYS:HA | 7 | 0.11 |
| (1,1298) | 1:A:46:ILE:HG23 | 1:A:47:LYS:HA | 7 | 0.11 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:74:ARG:H | 4 | 0.11 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:74:ARG:H | 4 | 0.11 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:74:ARG:H | 4 | 0.11 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:74:ARG:H | 5 | 0.11 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:74:ARG:H | 5 | 0.11 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:74:ARG:H | 5 | 0.11 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:74:ARG:H | 9 | 0.11 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:74:ARG:H | 9 | 0.11 |
| (1,1294) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:74:ARG:H | 9 | 0.11 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 4 | 0.11 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 4 | 0.11 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 4 | 0.11 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 9 | 0.11 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD12 | 14 | 0.11 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD11 | 14 | 0.11 |
| (1,1291) | 1:A:101:ILE:H | 1:A:101:ILE:HD13 | 14 | 0.11 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HD2 | 2 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HD2 | 2 | 0.11 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HD2 | 2 | 0.11 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD12 | 1:A:102:TYR:HD2 | 4 | 0.11 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD11 | 1:A:102:TYR:HD2 | 4 | 0.11 |
| (1,1284) | 1:A:87:ILE:HD13 | 1:A:102:TYR:HD2 | 4 | 0.11 |
| (1,1282) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:87:ILE:HD12 | 13 | 0.11 |
| (1,1282) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:87:ILE:HD11 | 13 | 0.11 |
| (1,1282) | 1:A:93:LEU:H | 1:A:87:ILE:HD13 | 13 | 0.11 |
| (1,1279) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HD12 | 13 | 0.11 |
| (1,1279) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HD11 | 13 | 0.11 |
| (1,1279) | 1:A:87:ILE:HA | 1:A:87:ILE:HD13 | 13 | 0.11 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD12 | 8 | 0.11 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD11 | 8 | 0.11 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD13 | 8 | 0.11 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD12 | 10 | 0.11 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD11 | 10 | 0.11 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD13 | 10 | 0.11 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD12 | 18 | 0.11 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD11 | 18 | 0.11 |
| (1,1258) | 1:A:43:LYS:HA | 1:A:46:ILE:HD13 | 18 | 0.11 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD12 | 1:A:144:ILE:HA | 4 | 0.11 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD11 | 1:A:144:ILE:HA | 4 | 0.11 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD13 | 1:A:144:ILE:HA | 4 | 0.11 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD12 | 1:A:144:ILE:HA | 9 | 0.11 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD11 | 1:A:144:ILE:HA | 9 | 0.11 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD13 | 1:A:144:ILE:HA | 9 | 0.11 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD12 | 1:A:144:ILE:HA | 10 | 0.11 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD11 | 1:A:144:ILE:HA | 10 | 0.11 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD13 | 1:A:144:ILE:HA | 10 | 0.11 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD12 | 1:A:144:ILE:HA | 12 | 0.11 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD11 | 1:A:144:ILE:HA | 12 | 0.11 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD13 | 1:A:144:ILE:HA | 12 | 0.11 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD12 | 1:A:144:ILE:HA | 14 | 0.11 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD11 | 1:A:144:ILE:HA | 14 | 0.11 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD13 | 1:A:144:ILE:HA | 14 | 0.11 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD12 | 1:A:144:ILE:HA | 17 | 0.11 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD11 | 1:A:144:ILE:HA | 17 | 0.11 |
| (1,1252) | 1:A:144:ILE:HD13 | 1:A:144:ILE:HA | 17 | 0.11 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD12 | 1:A:123:PHE:HE2 | 3 | 0.11 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD11 | 1:A:123:PHE:HE2 | 3 | 0.11 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD13 | 1:A:123:PHE:HE2 | 3 | 0.11 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD12 | 1:A:123:PHE:HE2 | 8 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD11 | 1:A:123:PHE:HE2 | 8 | 0.11 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD13 | 1:A:123:PHE:HE2 | 8 | 0.11 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD12 | 1:A:123:PHE:HE2 | 10 | 0.11 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD11 | 1:A:123:PHE:HE2 | 10 | 0.11 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD13 | 1:A:123:PHE:HE2 | 10 | 0.11 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD12 | 1:A:123:PHE:HE2 | 20 | 0.11 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD11 | 1:A:123:PHE:HE2 | 20 | 0.11 |
| (1,1251) | 1:A:46:ILE:HD13 | 1:A:123:PHE:HE2 | 20 | 0.11 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 6 | 0.11 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 6 | 0.11 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 6 | 0.11 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 9 | 0.11 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 12 | 0.11 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 12 | 0.11 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 12 | 0.11 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 15 | 0.11 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 15 | 0.11 |
| (1,1232) | 1:A:23:ILE:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 15 | 0.11 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD12 | 15 | 0.11 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD11 | 15 | 0.11 |
| (1,1229) | 1:A:24:ASN:H | 1:A:23:ILE:HD13 | 15 | 0.11 |
| (1,1227) | 1:A:36:ILE:HD12 | 1:A:32:LEU:HA | 15 | 0.11 |
| (1,1227) | 1:A:36:ILE:HD11 | 1:A:32:LEU:HA | 15 | 0.11 |
| (1,1227) | 1:A:36:ILE:HD13 | 1:A:32:LEU:HA | 15 | 0.11 |
| (1,1225) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:36:ILE:HD12 | 11 | 0.11 |
| (1,1225) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:36:ILE:HD11 | 11 | 0.11 |
| (1,1225) | 1:A:33:VAL:HG22 | 1:A:36:ILE:HD13 | 11 | 0.11 |
| (1,1225) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:36:ILE:HD12 | 11 | 0.11 |
| (1,1225) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:36:ILE:HD11 | 11 | 0.11 |
| (1,1225) | 1:A:33:VAL:HG21 | 1:A:36:ILE:HD13 | 11 | 0.11 |
| (1,1225) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:36:ILE:HD12 | 11 | 0.11 |
| (1,1225) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:36:ILE:HD11 | 11 | 0.11 |
| (1,1225) | 1:A:33:VAL:HG23 | 1:A:36:ILE:HD13 | 11 | 0.11 |
| (1,1222) | 1:A:87:ILE:HG22 | 1:A:87:ILE:HD12 | 9 | 0.11 |
| (1,1222) | 1:A:87:ILE:HG22 | 1:A:87:ILE:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,1222) | 1:A:87:ILE:HG22 | 1:A:87:ILE:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,1222) | 1:A:87:ILE:HG21 | 1:A:87:ILE:HD12 | 9 | 0.11 |
| (1,1222) | 1:A:87:ILE:HG21 | 1:A:87:ILE:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,1222) | 1:A:87:ILE:HG21 | 1:A:87:ILE:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,1222) | 1:A:87:ILE:HG23 | 1:A:87:ILE:HD12 | 9 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1222) | 1:A:87:ILE:HG23 | 1:A:87:ILE:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,1222) | 1:A:87:ILE:HG23 | 1:A:87:ILE:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG23 | 3 | 0.11 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG22 | 10 | 0.11 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG21 | 10 | 0.11 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG23 | 10 | 0.11 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG22 | 16 | 0.11 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG21 | 16 | 0.11 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG23 | 16 | 0.11 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG22 | 18 | 0.11 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG21 | 18 | 0.11 |
| (1,1219) | 1:A:88:GLU:H | 1:A:87:ILE:HG23 | 18 | 0.11 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,1206) | 1:A:144:ILE:H | 1:A:144:ILE:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:85:PHE:HA | 11 | 0.11 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:85:PHE:HA | 11 | 0.11 |
| (1,1198) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:85:PHE:HA | 11 | 0.11 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD12 | 9 | 0.11 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE2 | 1:A:87:ILE:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD12 | 9 | 0.11 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE1 | 1:A:87:ILE:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD12 | 9 | 0.11 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,1194) | 1:A:73:MET:HE3 | 1:A:87:ILE:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE2 | 4 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE1 | 4 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE3 | 4 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE2 | 4 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE1 | 4 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE3 | 4 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE2 | 4 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE1 | 4 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE3 | 4 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE2 | 7 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE1 | 7 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE3 | 7 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE2 | 7 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE1 | 7 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE3 | 7 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE2 | 7 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE1 | 7 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE3 | 7 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE2 | 11 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE1 | 11 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE3 | 11 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE2 | 11 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE1 | 11 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE3 | 11 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE2 | 11 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE1 | 11 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE3 | 11 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE2 | 14 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE1 | 14 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD22 | 1:A:73:MET:HE3 | 14 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE2 | 14 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE1 | 14 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD21 | 1:A:73:MET:HE3 | 14 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE2 | 14 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE1 | 14 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:69:LEU:HD23 | 1:A:73:MET:HE3 | 14 | 0.11 |
| (1,116) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,116) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,116) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:56:ARG:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,1159) | 1:A:27:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,1148) | 1:A:33:VAL:HA | 1:A:33:VAL:HG12 | 1 | 0.11 |
| (1,1148) | 1:A:33:VAL:HA | 1:A:33:VAL:HG11 | 1 | 0.11 |
| (1,1148) | 1:A:33:VAL:HA | 1:A:33:VAL:HG13 | 1 | 0.11 |
| (1,114) | 1:A:108:PHE:HE2 | 1:A:112:PHE:HA | 13 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD12 | 5 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD11 | 5 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD13 | 5 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD12 | 5 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD11 | 5 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD13 | 5 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD12 | 5 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD11 | 5 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD13 | 5 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD12 | 13 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD11 | 13 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD13 | 13 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD12 | 13 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD11 | 13 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD13 | 13 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD12 | 13 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD11 | 13 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD13 | 13 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD12 | 20 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD11 | 20 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG21 | 1:A:14:LEU:HD13 | 20 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD12 | 20 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD11 | 20 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG22 | 1:A:14:LEU:HD13 | 20 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD12 | 20 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD11 | 20 | 0.11 |
| (1,1135) | 1:A:28:THR:HG23 | 1:A:14:LEU:HD13 | 20 | 0.11 |
| (1,1131) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:28:THR:HG21 | 5 | 0.11 |
| (1,1131) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:28:THR:HG22 | 5 | 0.11 |
| (1,1131) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:28:THR:HG23 | 5 | 0.11 |
| (1,1131) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:28:THR:HG21 | 16 | 0.11 |
| (1,1131) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:28:THR:HG22 | 16 | 0.11 |
| (1,1131) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:28:THR:HG23 | 16 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG22 | 7 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG21 | 7 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG23 | 7 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG22 | 10 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG21 | 10 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG23 | 10 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG22 | 11 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG21 | 11 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG23 | 11 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG22 | 14 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG21 | 14 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG23 | 14 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG22 | 15 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG21 | 15 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG23 | 15 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG22 | 19 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG21 | 19 | 0.11 |
| (1,1120) | 1:A:41:THR:H | 1:A:42:VAL:HG23 | 19 | 0.11 |
| (1,1112) | 1:A:37:ASN:HD21 | 1:A:122:LEU:HD22 | 2 | 0.11 |
| (1,1112) | 1:A:37:ASN:HD21 | 1:A:122:LEU:HD21 | 2 | 0.11 |
| (1,1112) | 1:A:37:ASN:HD21 | 1:A:122:LEU:HD23 | 2 | 0.11 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD22 | 1:A:36:ILE:H | 3 | 0.11 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD21 | 1:A:36:ILE:H | 3 | 0.11 |
| (1,1087) | 1:A:32:LEU:HD23 | 1:A:36:ILE:H | 3 | 0.11 |
| (1,1086) | 1:A:115:VAL:HG12 | 1:A:54:LEU:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,1086) | 1:A:115:VAL:HG11 | 1:A:54:LEU:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,1086) | 1:A:115:VAL:HG13 | 1:A:54:LEU:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD12 | 1:A:32:LEU:HA | 8 | 0.11 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD11 | 1:A:32:LEU:HA | 8 | 0.11 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD13 | 1:A:32:LEU:HA | 8 | 0.11 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD12 | 1:A:32:LEU:HA | 16 | 0.11 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD11 | 1:A:32:LEU:HA | 16 | 0.11 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD13 | 1:A:32:LEU:HA | 16 | 0.11 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD12 | 1:A:32:LEU:HA | 19 | 0.11 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD11 | 1:A:32:LEU:HA | 19 | 0.11 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD13 | 1:A:32:LEU:HA | 19 | 0.11 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD12 | 1:A:32:LEU:HA | 20 | 0.11 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD11 | 1:A:32:LEU:HA | 20 | 0.11 |
| (1,1061) | 1:A:32:LEU:HD13 | 1:A:32:LEU:HA | 20 | 0.11 |
| (1,1055) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,1055) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,1055) | 1:A:59:LEU:H | 1:A:58:CYS:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,104) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HA | 1 | 0.11 |
| (1,104) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HA | 2 | 0.11 |
| (1,104) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HA | 5 | 0.11 |
| (1,104) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HA | 6 | 0.11 |
| (1,104) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HA | 13 | 0.11 |
| (1,104) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HA | 17 | 0.11 |
| (1,104) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:61:TYR:HA | 19 | 0.11 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD22 | 18 | 0.11 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD21 | 18 | 0.11 |
| (1,103) | 1:A:66:PHE:HD1 | 1:A:69:LEU:HD23 | 18 | 0.11 |
| (1,1028) | 1:A:121:ARG:H | 1:A:121:ARG:HG2 | 1 | 0.11 |
| (1,1028) | 1:A:121:ARG:H | 1:A:121:ARG:HG2 | 15 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|------------|-----------------|-----------------|-----------------|----------------------|
| (1,1028) | 1:A:121:ARG:H | 1:A:121:ARG:HG2 | 20 | 0.11 |
| (1,1019) | 1:A:103:ARG:HG3 | 1:A:105:PHE:H | 3 | 0.11 |
| (1,1001) | 1:A:20:LYS:HD3 | 1:A:20:LYS:HA | 11 | 0.11 |

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

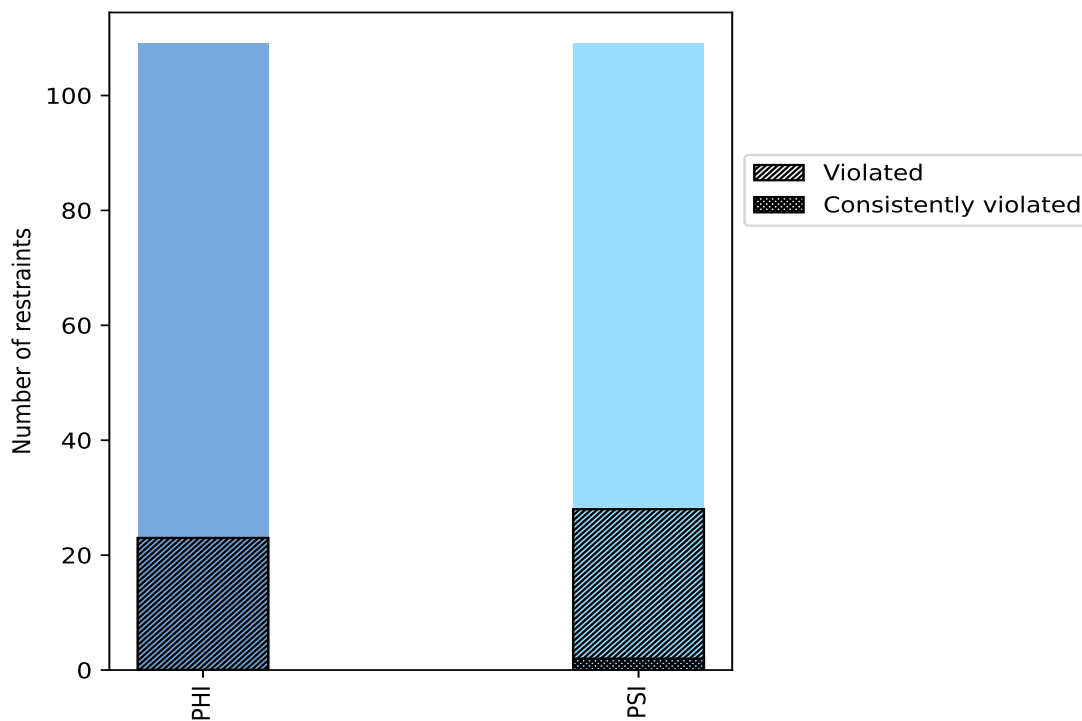
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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 | 109 | 50.0 | 23 | 21.1 | 10.6 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| PSI | 109 | 50.0 | 28 | 25.7 | 12.8 | 2 | 1.8 | 0.9 |
| Total | 218 | 100.0 | 51 | 23.4 | 23.4 | 2 | 0.9 | 0.9 |

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](#)



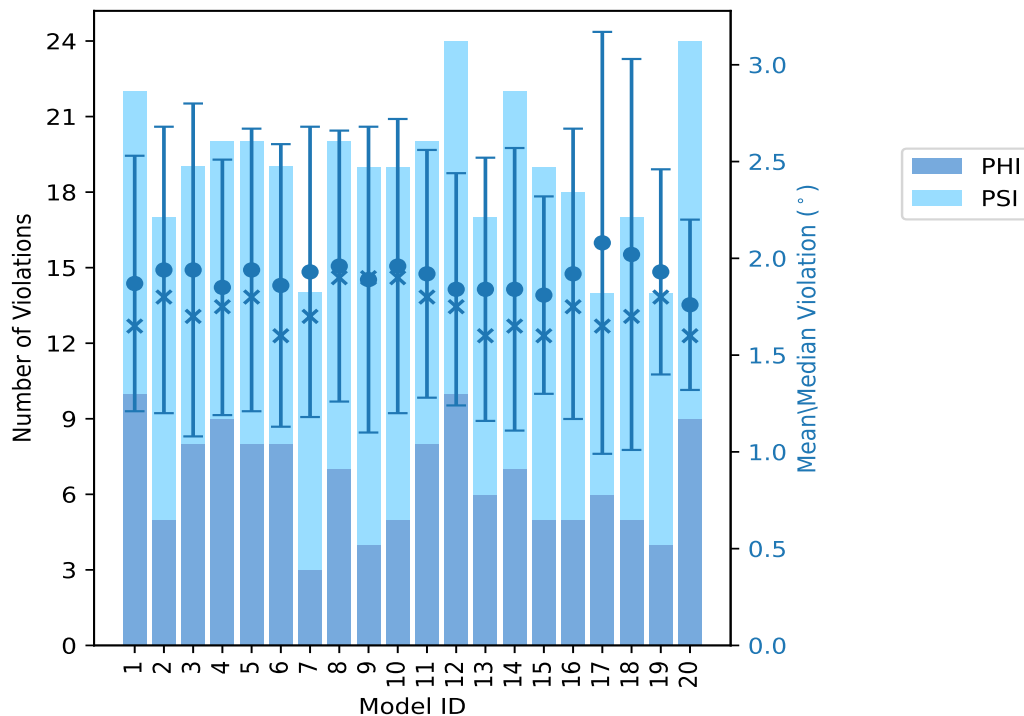
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

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 | 10 | 12 | 22 | 1.87 | 3.4 | 0.66 | 1.65 |
| 2 | 5 | 12 | 17 | 1.94 | 3.8 | 0.74 | 1.8 |
| 3 | 8 | 11 | 19 | 1.94 | 4.4 | 0.86 | 1.7 |
| 4 | 9 | 11 | 20 | 1.85 | 3.5 | 0.66 | 1.75 |
| 5 | 8 | 12 | 20 | 1.94 | 3.8 | 0.73 | 1.8 |
| 6 | 8 | 11 | 19 | 1.86 | 3.9 | 0.73 | 1.6 |
| 7 | 3 | 11 | 14 | 1.93 | 3.8 | 0.75 | 1.7 |
| 8 | 7 | 13 | 20 | 1.96 | 4.1 | 0.7 | 1.9 |
| 9 | 4 | 15 | 19 | 1.89 | 4.5 | 0.79 | 1.9 |
| 10 | 5 | 14 | 19 | 1.96 | 3.9 | 0.76 | 1.9 |
| 11 | 8 | 12 | 20 | 1.92 | 3.9 | 0.64 | 1.8 |
| 12 | 10 | 14 | 24 | 1.84 | 3.6 | 0.6 | 1.75 |
| 13 | 6 | 11 | 17 | 1.84 | 3.5 | 0.68 | 1.6 |
| 14 | 7 | 15 | 22 | 1.84 | 4.0 | 0.73 | 1.65 |
| 15 | 5 | 14 | 19 | 1.81 | 3.1 | 0.51 | 1.6 |
| 16 | 5 | 13 | 18 | 1.92 | 3.7 | 0.75 | 1.75 |
| 17 | 6 | 8 | 14 | 2.08 | 5.1 | 1.09 | 1.65 |
| 18 | 5 | 12 | 17 | 2.02 | 5.0 | 1.01 | 1.7 |
| 19 | 4 | 10 | 14 | 1.93 | 3.2 | 0.53 | 1.8 |
| 20 | 9 | 15 | 24 | 1.76 | 2.9 | 0.44 | 1.6 |

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 | % |
| 8 | 8 | 16 | 1 | 5.0 |
| 2 | 2 | 4 | 2 | 10.0 |
| 2 | 0 | 2 | 3 | 15.0 |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 20.0 |
| 1 | 2 | 3 | 5 | 25.0 |
| 3 | 0 | 3 | 6 | 30.0 |
| 0 | 0 | 0 | 7 | 35.0 |
| 0 | 0 | 0 | 8 | 40.0 |
| 1 | 0 | 1 | 9 | 45.0 |
| 0 | 1 | 1 | 10 | 50.0 |
| 0 | 1 | 1 | 11 | 55.0 |

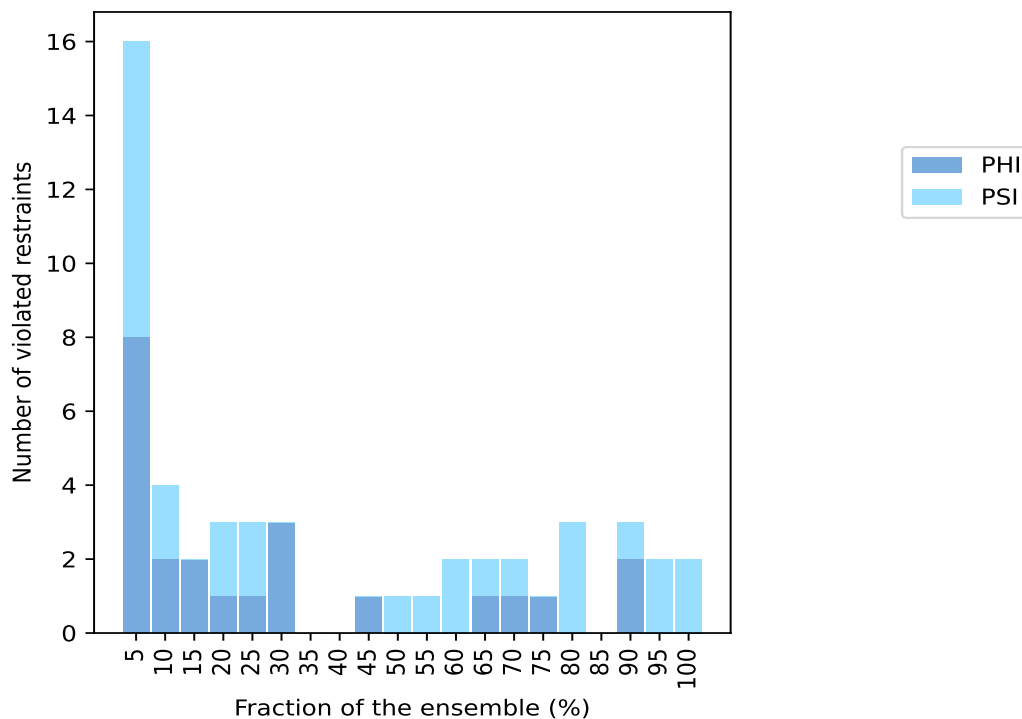
Continued on next page...

Continued from previous page...

| Number of violated restraints | | | Fraction of the ensemble | |
|-------------------------------|-----|-------|--------------------------|-------|
| PHI | PSI | Total | Count ¹ | % |
| 0 | 2 | 2 | 12 | 60.0 |
| 1 | 1 | 2 | 13 | 65.0 |
| 1 | 1 | 2 | 14 | 70.0 |
| 1 | 0 | 1 | 15 | 75.0 |
| 0 | 3 | 3 | 16 | 80.0 |
| 0 | 0 | 0 | 17 | 85.0 |
| 2 | 1 | 3 | 18 | 90.0 |
| 0 | 2 | 2 | 19 | 95.0 |
| 0 | 2 | 2 | 20 | 100.0 |

¹ Number of models with violations

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

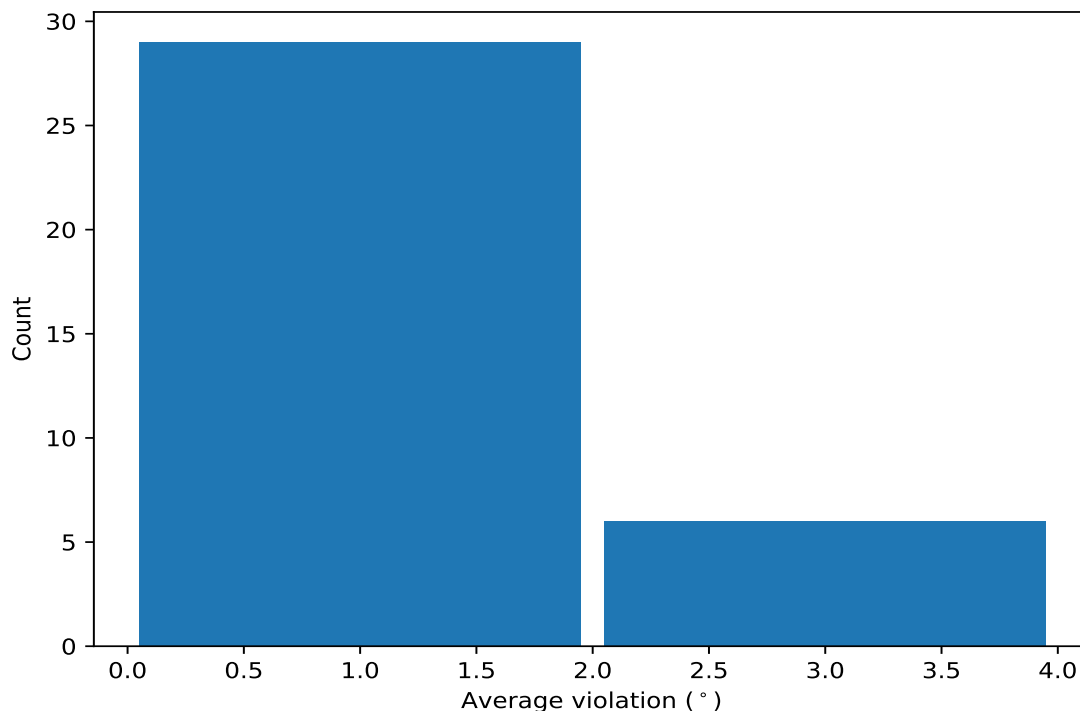


10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble [i](#)

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

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

in the ensemble



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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Models ¹ | Mean | SD ² | Median |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|---------------------|------|-----------------|--------|
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 20 | 3.74 | 0.68 | 3.7 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 20 | 2.16 | 0.57 | 2.15 |
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 19 | 2.01 | 0.34 | 2.0 |
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 19 | 2.01 | 0.38 | 2.0 |
| (1,7) | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 1:A:16:GLN:N | 18 | 3.06 | 0.65 | 3.25 |
| (1,80) | 1:A:53:ASP:C | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 18 | 1.85 | 0.56 | 1.8 |
| (1,104) | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CA | 1:A:66:PHE:C | 18 | 1.83 | 0.34 | 1.8 |
| (1,203) | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 1:A:119:LYS:N | 16 | 1.88 | 0.34 | 1.8 |
| (1,1) | 1:A:12:ALA:N | 1:A:12:ALA:CA | 1:A:12:ALA:C | 1:A:13:GLY:N | 16 | 1.8 | 0.45 | 1.75 |
| (1,109) | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 1:A:70:VAL:N | 16 | 1.54 | 0.28 | 1.5 |
| (1,204) | 1:A:117:ASP:C | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 15 | 1.57 | 0.29 | 1.6 |
| (1,100) | 1:A:63:GLU:C | 1:A:64:ALA:N | 1:A:64:ALA:CA | 1:A:64:ALA:C | 14 | 1.96 | 0.53 | 2.0 |
| (1,177) | 1:A:105:PHE:N | 1:A:105:PHE:CA | 1:A:105:PHE:C | 1:A:106:ASN:N | 14 | 1.38 | 0.25 | 1.35 |
| (1,110) | 1:A:68:THR:C | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 13 | 1.7 | 0.34 | 1.8 |
| (1,13) | 1:A:18:THR:N | 1:A:18:THR:CA | 1:A:18:THR:C | 1:A:19:ASN:N | 13 | 1.62 | 0.45 | 1.4 |
| (1,127) | 1:A:78:GLU:N | 1:A:78:GLU:CA | 1:A:78:GLU:C | 1:A:79:ASN:N | 12 | 2.43 | 0.65 | 2.4 |
| (1,123) | 1:A:76:LYS:N | 1:A:76:LYS:CA | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 12 | 1.79 | 0.46 | 1.85 |
| (1,79) | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 1:A:55:SER:N | 11 | 1.52 | 0.29 | 1.5 |
| (1,117) | 1:A:73:MET:N | 1:A:73:MET:CA | 1:A:73:MET:C | 1:A:74:ARG:N | 10 | 1.51 | 0.3 | 1.45 |
| (1,126) | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 1:A:77:ILE:CA | 1:A:77:ILE:C | 9 | 1.31 | 0.21 | 1.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

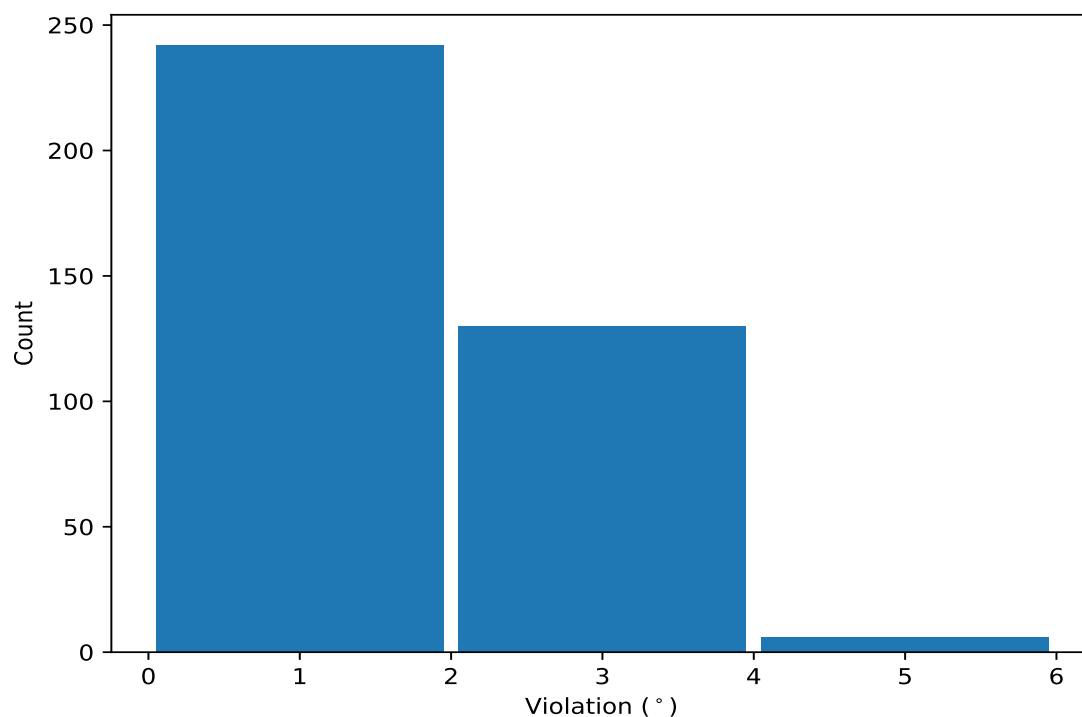
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Models ¹ | Mean | SD ² | Median |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|---------------------|------|-----------------|--------|
| (1,18) | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 6 | 1.52 | 0.32 | 1.5 |
| (1,160) | 1:A:95:ASN:C | 1:A:96:PRO:N | 1:A:96:PRO:CA | 1:A:96:PRO:C | 6 | 1.33 | 0.14 | 1.3 |
| (1,144) | 1:A:85:PHE:C | 1:A:86:ASN:N | 1:A:86:ASN:CA | 1:A:86:ASN:C | 6 | 1.23 | 0.2 | 1.1 |
| (1,78) | 1:A:52:PHE:C | 1:A:53:ASP:N | 1:A:53:ASP:CA | 1:A:53:ASP:C | 5 | 1.68 | 0.25 | 1.6 |
| (1,207) | 1:A:120:LYS:N | 1:A:120:LYS:CA | 1:A:120:LYS:C | 1:A:121:ARG:N | 5 | 1.68 | 0.55 | 1.5 |
| (1,59) | 1:A:43:LYS:N | 1:A:43:LYS:CA | 1:A:43:LYS:C | 1:A:44:ARG:N | 5 | 1.32 | 0.13 | 1.3 |
| (1,217) | 1:A:139:PHE:N | 1:A:139:PHE:CA | 1:A:139:PHE:C | 1:A:140:GLU:N | 4 | 1.92 | 0.27 | 2.0 |
| (1,35) | 1:A:31:GLU:N | 1:A:31:GLU:CA | 1:A:31:GLU:C | 1:A:32:LEU:N | 4 | 1.58 | 0.29 | 1.6 |
| (1,168) | 1:A:99:GLU:C | 1:A:100:THR:N | 1:A:100:THR:CA | 1:A:100:THR:C | 4 | 1.23 | 0.11 | 1.2 |
| (1,208) | 1:A:119:LYS:C | 1:A:120:LYS:N | 1:A:120:LYS:CA | 1:A:120:LYS:C | 3 | 1.73 | 0.39 | 1.9 |
| (1,8) | 1:A:14:LEU:C | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 3 | 1.27 | 0.12 | 1.3 |
| (1,36) | 1:A:30:ASP:C | 1:A:31:GLU:N | 1:A:31:GLU:CA | 1:A:31:GLU:C | 2 | 1.85 | 0.75 | 1.85 |
| (1,42) | 1:A:33:VAL:C | 1:A:34:ASP:N | 1:A:34:ASP:CA | 1:A:34:ASP:C | 2 | 1.45 | 0.25 | 1.45 |
| (1,135) | 1:A:82:VAL:N | 1:A:82:VAL:CA | 1:A:82:VAL:C | 1:A:83:VAL:N | 2 | 1.25 | 0.15 | 1.25 |
| (1,205) | 1:A:119:LYS:N | 1:A:119:LYS:CA | 1:A:119:LYS:C | 1:A:120:LYS:N | 2 | 1.2 | 0.1 | 1.2 |

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

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

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

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



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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 17 | 5.1 |
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 18 | 5.0 |
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 9 | 4.5 |
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 3 | 4.4 |
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 8 | 4.1 |
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 14 | 4.0 |
| (1,7) | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 1:A:16:GLN:N | 10 | 3.9 |
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 6 | 3.9 |
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 11 | 3.9 |
| (1,7) | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 1:A:16:GLN:N | 2 | 3.8 |
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 5 | 3.8 |
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 7 | 3.8 |
| (1,7) | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 1:A:16:GLN:N | 16 | 3.7 |
| (1,7) | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 1:A:16:GLN:N | 17 | 3.7 |
| (1,7) | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 1:A:16:GLN:N | 18 | 3.6 |
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 2 | 3.6 |
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 12 | 3.6 |
| (1,7) | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 1:A:16:GLN:N | 3 | 3.5 |
| (1,7) | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 1:A:16:GLN:N | 5 | 3.5 |
| (1,7) | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 1:A:16:GLN:N | 13 | 3.5 |
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 4 | 3.5 |
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 10 | 3.5 |
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 16 | 3.5 |
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 1 | 3.4 |
| (1,7) | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 1:A:16:GLN:N | 12 | 3.3 |
| (1,127) | 1:A:78:GLU:N | 1:A:78:GLU:CA | 1:A:78:GLU:C | 1:A:79:ASN:N | 1 | 3.3 |
| (1,80) | 1:A:53:ASP:C | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 4 | 3.2 |
| (1,7) | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 1:A:16:GLN:N | 6 | 3.2 |
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 19 | 3.2 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 17 | 3.2 |
| (1,127) | 1:A:78:GLU:N | 1:A:78:GLU:CA | 1:A:78:GLU:C | 1:A:79:ASN:N | 16 | 3.2 |
| (1,7) | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 1:A:16:GLN:N | 7 | 3.1 |
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 15 | 3.1 |
| (1,127) | 1:A:78:GLU:N | 1:A:78:GLU:CA | 1:A:78:GLU:C | 1:A:79:ASN:N | 14 | 3.1 |
| (1,127) | 1:A:78:GLU:N | 1:A:78:GLU:CA | 1:A:78:GLU:C | 1:A:79:ASN:N | 13 | 3.0 |
| (1,7) | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 1:A:16:GLN:N | 1 | 2.9 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 5 | 2.9 |
| (1,127) | 1:A:78:GLU:N | 1:A:78:GLU:CA | 1:A:78:GLU:C | 1:A:79:ASN:N | 8 | 2.9 |
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 20 | 2.9 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 1 | 2.8 |
| (1,100) | 1:A:63:GLU:C | 1:A:64:ALA:N | 1:A:64:ALA:CA | 1:A:64:ALA:C | 14 | 2.8 |
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 18 | 2.7 |
| (1,207) | 1:A:120:LYS:N | 1:A:120:LYS:CA | 1:A:120:LYS:C | 1:A:121:ARG:N | 4 | 2.7 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 7 | 2.7 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 10 | 2.7 |
| (1,127) | 1:A:78:GLU:N | 1:A:78:GLU:CA | 1:A:78:GLU:C | 1:A:79:ASN:N | 6 | 2.7 |
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 9 | 2.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,100) | 1:A:63:GLU:C | 1:A:64:ALA:N | 1:A:64:ALA:CA | 1:A:64:ALA:C | 11 | 2.7 |
| (1,1) | 1:A:12:ALA:N | 1:A:12:ALA:CA | 1:A:12:ALA:C | 1:A:13:GLY:N | 4 | 2.7 |
| (1,80) | 1:A:53:ASP:C | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 18 | 2.6 |
| (1,7) | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 1:A:16:GLN:N | 14 | 2.6 |
| (1,36) | 1:A:30:ASP:C | 1:A:31:GLU:N | 1:A:31:GLU:CA | 1:A:31:GLU:C | 8 | 2.6 |
| (1,203) | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 1:A:119:LYS:N | 15 | 2.6 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 3 | 2.6 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 8 | 2.6 |
| (1,123) | 1:A:76:LYS:N | 1:A:76:LYS:CA | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 12 | 2.6 |
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 18 | 2.6 |
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 19 | 2.5 |
| (1,80) | 1:A:53:ASP:C | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 3 | 2.5 |
| (1,7) | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 1:A:16:GLN:N | 19 | 2.5 |
| (1,203) | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 1:A:119:LYS:N | 3 | 2.5 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 15 | 2.5 |
| (1,13) | 1:A:18:THR:N | 1:A:18:THR:CA | 1:A:18:THR:C | 1:A:19:ASN:N | 20 | 2.5 |
| (1,104) | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CA | 1:A:66:PHE:C | 9 | 2.5 |
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 6 | 2.4 |
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 13 | 2.4 |
| (1,80) | 1:A:53:ASP:C | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 12 | 2.4 |
| (1,7) | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 1:A:16:GLN:N | 11 | 2.4 |
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 13 | 2.4 |
| (1,23) | 1:A:23:ILE:N | 1:A:23:ILE:CA | 1:A:23:ILE:C | 1:A:24:ASN:N | 20 | 2.4 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 9 | 2.4 |
| (1,104) | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CA | 1:A:66:PHE:C | 10 | 2.4 |
| (1,1) | 1:A:12:ALA:N | 1:A:12:ALA:CA | 1:A:12:ALA:C | 1:A:13:GLY:N | 11 | 2.4 |
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 3 | 2.3 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 2 | 2.3 |
| (1,13) | 1:A:18:THR:N | 1:A:18:THR:CA | 1:A:18:THR:C | 1:A:19:ASN:N | 11 | 2.3 |
| (1,123) | 1:A:76:LYS:N | 1:A:76:LYS:CA | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 5 | 2.3 |
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 10 | 2.3 |
| (1,104) | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CA | 1:A:66:PHE:C | 19 | 2.3 |
| (1,100) | 1:A:63:GLU:C | 1:A:64:ALA:N | 1:A:64:ALA:CA | 1:A:64:ALA:C | 18 | 2.3 |
| (1,100) | 1:A:63:GLU:C | 1:A:64:ALA:N | 1:A:64:ALA:CA | 1:A:64:ALA:C | 20 | 2.3 |
| (1,1) | 1:A:12:ALA:N | 1:A:12:ALA:CA | 1:A:12:ALA:C | 1:A:13:GLY:N | 9 | 2.3 |
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 1 | 2.2 |
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 20 | 2.2 |
| (1,80) | 1:A:53:ASP:C | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 10 | 2.2 |
| (1,80) | 1:A:53:ASP:C | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 15 | 2.2 |
| (1,217) | 1:A:139:PHE:N | 1:A:139:PHE:CA | 1:A:139:PHE:C | 1:A:140:GLU:N | 14 | 2.2 |
| (1,204) | 1:A:117:ASP:C | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 2 | 2.2 |
| (1,203) | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 1:A:119:LYS:N | 8 | 2.2 |
| (1,13) | 1:A:18:THR:N | 1:A:18:THR:CA | 1:A:18:THR:C | 1:A:19:ASN:N | 13 | 2.2 |
| (1,123) | 1:A:76:LYS:N | 1:A:76:LYS:CA | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 6 | 2.2 |
| (1,117) | 1:A:73:MET:N | 1:A:73:MET:CA | 1:A:73:MET:C | 1:A:74:ARG:N | 10 | 2.2 |
| (1,110) | 1:A:68:THR:C | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 5 | 2.2 |
| (1,109) | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 1:A:70:VAL:N | 2 | 2.2 |
| (1,104) | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CA | 1:A:66:PHE:C | 11 | 2.2 |
| (1,100) | 1:A:63:GLU:C | 1:A:64:ALA:N | 1:A:64:ALA:CA | 1:A:64:ALA:C | 13 | 2.2 |
| (1,100) | 1:A:63:GLU:C | 1:A:64:ALA:N | 1:A:64:ALA:CA | 1:A:64:ALA:C | 15 | 2.2 |
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 7 | 2.1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 11 | 2.1 |
| (1,79) | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 1:A:55:SER:N | 16 | 2.1 |
| (1,78) | 1:A:52:PHE:C | 1:A:53:ASP:N | 1:A:53:ASP:CA | 1:A:53:ASP:C | 1 | 2.1 |
| (1,7) | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 1:A:16:GLN:N | 9 | 2.1 |
| (1,7) | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 1:A:16:GLN:N | 15 | 2.1 |
| (1,46) | 1:A:35:GLU:C | 1:A:36:ILE:N | 1:A:36:ILE:CA | 1:A:36:ILE:C | 20 | 2.1 |
| (1,217) | 1:A:139:PHE:N | 1:A:139:PHE:CA | 1:A:139:PHE:C | 1:A:140:GLU:N | 16 | 2.1 |
| (1,208) | 1:A:119:LYS:C | 1:A:120:LYS:N | 1:A:120:LYS:CA | 1:A:120:LYS:C | 5 | 2.1 |
| (1,203) | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 1:A:119:LYS:N | 1 | 2.1 |
| (1,127) | 1:A:78:GLU:N | 1:A:78:GLU:CA | 1:A:78:GLU:C | 1:A:79:ASN:N | 5 | 2.1 |
| (1,127) | 1:A:78:GLU:N | 1:A:78:GLU:CA | 1:A:78:GLU:C | 1:A:79:ASN:N | 11 | 2.1 |
| (1,123) | 1:A:76:LYS:N | 1:A:76:LYS:CA | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 2 | 2.1 |
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 2 | 2.1 |
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 5 | 2.1 |
| (1,110) | 1:A:68:THR:C | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 20 | 2.1 |
| (1,1) | 1:A:12:ALA:N | 1:A:12:ALA:CA | 1:A:12:ALA:C | 1:A:13:GLY:N | 8 | 2.1 |
| (1,1) | 1:A:12:ALA:N | 1:A:12:ALA:CA | 1:A:12:ALA:C | 1:A:13:GLY:N | 10 | 2.1 |
| (1,1) | 1:A:12:ALA:N | 1:A:12:ALA:CA | 1:A:12:ALA:C | 1:A:13:GLY:N | 14 | 2.1 |
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 12 | 2.0 |
| (1,44) | 1:A:34:ASP:C | 1:A:35:GLU:N | 1:A:35:GLU:CA | 1:A:35:GLU:C | 3 | 2.0 |
| (1,203) | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 1:A:119:LYS:N | 4 | 2.0 |
| (1,203) | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 1:A:119:LYS:N | 20 | 2.0 |
| (1,18) | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 1 | 2.0 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 6 | 2.0 |
| (1,13) | 1:A:18:THR:N | 1:A:18:THR:CA | 1:A:18:THR:C | 1:A:19:ASN:N | 14 | 2.0 |
| (1,127) | 1:A:78:GLU:N | 1:A:78:GLU:CA | 1:A:78:GLU:C | 1:A:79:ASN:N | 9 | 2.0 |
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 6 | 2.0 |
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 12 | 2.0 |
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 13 | 2.0 |
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 14 | 2.0 |
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 15 | 2.0 |
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 19 | 2.0 |
| (1,110) | 1:A:68:THR:C | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 3 | 2.0 |
| (1,110) | 1:A:68:THR:C | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 10 | 2.0 |
| (1,104) | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CA | 1:A:66:PHE:C | 8 | 2.0 |
| (1,100) | 1:A:63:GLU:C | 1:A:64:ALA:N | 1:A:64:ALA:CA | 1:A:64:ALA:C | 1 | 2.0 |
| (1,100) | 1:A:63:GLU:C | 1:A:64:ALA:N | 1:A:64:ALA:CA | 1:A:64:ALA:C | 9 | 2.0 |
| (1,100) | 1:A:63:GLU:C | 1:A:64:ALA:N | 1:A:64:ALA:CA | 1:A:64:ALA:C | 19 | 2.0 |
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 5 | 1.9 |
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 14 | 1.9 |
| (1,80) | 1:A:53:ASP:C | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 7 | 1.9 |
| (1,80) | 1:A:53:ASP:C | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 8 | 1.9 |
| (1,80) | 1:A:53:ASP:C | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 17 | 1.9 |
| (1,79) | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 1:A:55:SER:N | 9 | 1.9 |
| (1,35) | 1:A:31:GLU:N | 1:A:31:GLU:CA | 1:A:31:GLU:C | 1:A:32:LEU:N | 8 | 1.9 |
| (1,217) | 1:A:139:PHE:N | 1:A:139:PHE:CA | 1:A:139:PHE:C | 1:A:140:GLU:N | 8 | 1.9 |
| (1,208) | 1:A:119:LYS:C | 1:A:120:LYS:N | 1:A:120:LYS:CA | 1:A:120:LYS:C | 12 | 1.9 |
| (1,204) | 1:A:117:ASP:C | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 8 | 1.9 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 12 | 1.9 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 16 | 1.9 |
| (1,127) | 1:A:78:GLU:N | 1:A:78:GLU:CA | 1:A:78:GLU:C | 1:A:79:ASN:N | 10 | 1.9 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,123) | 1:A:76:LYS:N | 1:A:76:LYS:CA | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 9 | 1.9 |
| (1,123) | 1:A:76:LYS:N | 1:A:76:LYS:CA | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 16 | 1.9 |
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 11 | 1.9 |
| (1,110) | 1:A:68:THR:C | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 6 | 1.9 |
| (1,109) | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 1:A:70:VAL:N | 8 | 1.9 |
| (1,104) | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CA | 1:A:66:PHE:C | 4 | 1.9 |
| (1,104) | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CA | 1:A:66:PHE:C | 15 | 1.9 |
| (1,104) | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CA | 1:A:66:PHE:C | 17 | 1.9 |
| (1,101) | 1:A:65:ASP:N | 1:A:65:ASP:CA | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 2 | 1.9 |
| (1,1) | 1:A:12:ALA:N | 1:A:12:ALA:CA | 1:A:12:ALA:C | 1:A:13:GLY:N | 7 | 1.9 |
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 8 | 1.8 |
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 17 | 1.8 |
| (1,79) | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 1:A:55:SER:N | 2 | 1.8 |
| (1,78) | 1:A:52:PHE:C | 1:A:53:ASP:N | 1:A:53:ASP:CA | 1:A:53:ASP:C | 12 | 1.8 |
| (1,35) | 1:A:31:GLU:N | 1:A:31:GLU:CA | 1:A:31:GLU:C | 1:A:32:LEU:N | 4 | 1.8 |
| (1,204) | 1:A:117:ASP:C | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 3 | 1.8 |
| (1,204) | 1:A:117:ASP:C | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 4 | 1.8 |
| (1,204) | 1:A:117:ASP:C | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 12 | 1.8 |
| (1,203) | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 1:A:119:LYS:N | 5 | 1.8 |
| (1,203) | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 1:A:119:LYS:N | 7 | 1.8 |
| (1,203) | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 1:A:119:LYS:N | 14 | 1.8 |
| (1,203) | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 1:A:119:LYS:N | 18 | 1.8 |
| (1,18) | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 5 | 1.8 |
| (1,177) | 1:A:105:PHE:N | 1:A:105:PHE:CA | 1:A:105:PHE:C | 1:A:106:ASN:N | 4 | 1.8 |
| (1,177) | 1:A:105:PHE:N | 1:A:105:PHE:CA | 1:A:105:PHE:C | 1:A:106:ASN:N | 19 | 1.8 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 4 | 1.8 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 20 | 1.8 |
| (1,123) | 1:A:76:LYS:N | 1:A:76:LYS:CA | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 19 | 1.8 |
| (1,117) | 1:A:73:MET:N | 1:A:73:MET:CA | 1:A:73:MET:C | 1:A:74:ARG:N | 16 | 1.8 |
| (1,110) | 1:A:68:THR:C | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 11 | 1.8 |
| (1,110) | 1:A:68:THR:C | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 12 | 1.8 |
| (1,109) | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 1:A:70:VAL:N | 11 | 1.8 |
| (1,104) | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CA | 1:A:66:PHE:C | 16 | 1.8 |
| (1,104) | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CA | 1:A:66:PHE:C | 18 | 1.8 |
| (1,100) | 1:A:63:GLU:C | 1:A:64:ALA:N | 1:A:64:ALA:CA | 1:A:64:ALA:C | 8 | 1.8 |
| (1,100) | 1:A:63:GLU:C | 1:A:64:ALA:N | 1:A:64:ALA:CA | 1:A:64:ALA:C | 12 | 1.8 |
| (1,1) | 1:A:12:ALA:N | 1:A:12:ALA:CA | 1:A:12:ALA:C | 1:A:13:GLY:N | 20 | 1.8 |
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 10 | 1.7 |
| (1,80) | 1:A:53:ASP:C | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 11 | 1.7 |
| (1,7) | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 1:A:16:GLN:N | 20 | 1.7 |
| (1,42) | 1:A:33:VAL:C | 1:A:34:ASP:N | 1:A:34:ASP:CA | 1:A:34:ASP:C | 2 | 1.7 |
| (1,207) | 1:A:120:LYS:N | 1:A:120:LYS:CA | 1:A:120:LYS:C | 1:A:121:ARG:N | 5 | 1.7 |
| (1,204) | 1:A:117:ASP:C | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 1 | 1.7 |
| (1,204) | 1:A:117:ASP:C | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 11 | 1.7 |
| (1,203) | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 1:A:119:LYS:N | 10 | 1.7 |
| (1,203) | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 1:A:119:LYS:N | 12 | 1.7 |
| (1,203) | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 1:A:119:LYS:N | 19 | 1.7 |
| (1,177) | 1:A:105:PHE:N | 1:A:105:PHE:CA | 1:A:105:PHE:C | 1:A:106:ASN:N | 11 | 1.7 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 14 | 1.7 |
| (1,126) | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 1:A:77:ILE:CA | 1:A:77:ILE:C | 16 | 1.7 |
| (1,123) | 1:A:76:LYS:N | 1:A:76:LYS:CA | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 4 | 1.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 3 | 1.7 |
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 8 | 1.7 |
| (1,110) | 1:A:68:THR:C | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 1 | 1.7 |
| (1,109) | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 1:A:70:VAL:N | 15 | 1.7 |
| (1,109) | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 1:A:70:VAL:N | 17 | 1.7 |
| (1,104) | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CA | 1:A:66:PHE:C | 12 | 1.7 |
| (1,104) | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CA | 1:A:66:PHE:C | 13 | 1.7 |
| (1,1) | 1:A:12:ALA:N | 1:A:12:ALA:CA | 1:A:12:ALA:C | 1:A:13:GLY:N | 12 | 1.7 |
| (1,1) | 1:A:12:ALA:N | 1:A:12:ALA:CA | 1:A:12:ALA:C | 1:A:13:GLY:N | 18 | 1.7 |
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 4 | 1.6 |
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 15 | 1.6 |
| (1,80) | 1:A:53:ASP:C | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 5 | 1.6 |
| (1,80) | 1:A:53:ASP:C | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 20 | 1.6 |
| (1,79) | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 1:A:55:SER:N | 6 | 1.6 |
| (1,78) | 1:A:52:PHE:C | 1:A:53:ASP:N | 1:A:53:ASP:CA | 1:A:53:ASP:C | 6 | 1.6 |
| (1,204) | 1:A:117:ASP:C | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 10 | 1.6 |
| (1,203) | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 1:A:119:LYS:N | 13 | 1.6 |
| (1,203) | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 1:A:119:LYS:N | 17 | 1.6 |
| (1,18) | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 17 | 1.6 |
| (1,160) | 1:A:95:ASN:C | 1:A:96:PRO:N | 1:A:96:PRO:CA | 1:A:96:PRO:C | 12 | 1.6 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 19 | 1.6 |
| (1,144) | 1:A:85:PHE:C | 1:A:86:ASN:N | 1:A:86:ASN:CA | 1:A:86:ASN:C | 19 | 1.6 |
| (1,127) | 1:A:78:GLU:N | 1:A:78:GLU:CA | 1:A:78:GLU:C | 1:A:79:ASN:N | 19 | 1.6 |
| (1,126) | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 1:A:77:ILE:CA | 1:A:77:ILE:C | 11 | 1.6 |
| (1,123) | 1:A:76:LYS:N | 1:A:76:LYS:CA | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 7 | 1.6 |
| (1,117) | 1:A:73:MET:N | 1:A:73:MET:CA | 1:A:73:MET:C | 1:A:74:ARG:N | 9 | 1.6 |
| (1,117) | 1:A:73:MET:N | 1:A:73:MET:CA | 1:A:73:MET:C | 1:A:74:ARG:N | 15 | 1.6 |
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 4 | 1.6 |
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 7 | 1.6 |
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 17 | 1.6 |
| (1,110) | 1:A:68:THR:C | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 2 | 1.6 |
| (1,109) | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 1:A:70:VAL:N | 14 | 1.6 |
| (1,104) | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CA | 1:A:66:PHE:C | 6 | 1.6 |
| (1,104) | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CA | 1:A:66:PHE:C | 20 | 1.6 |
| (1,1) | 1:A:12:ALA:N | 1:A:12:ALA:CA | 1:A:12:ALA:C | 1:A:13:GLY:N | 1 | 1.6 |
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 9 | 1.5 |
| (1,95) | 1:A:62:PRO:N | 1:A:62:PRO:CA | 1:A:62:PRO:C | 1:A:63:GLU:N | 16 | 1.5 |
| (1,79) | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 1:A:55:SER:N | 15 | 1.5 |
| (1,79) | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 1:A:55:SER:N | 20 | 1.5 |
| (1,78) | 1:A:52:PHE:C | 1:A:53:ASP:N | 1:A:53:ASP:CA | 1:A:53:ASP:C | 20 | 1.5 |
| (1,59) | 1:A:43:LYS:N | 1:A:43:LYS:CA | 1:A:43:LYS:C | 1:A:44:ARG:N | 12 | 1.5 |
| (1,58) | 1:A:41:THR:C | 1:A:42:VAL:N | 1:A:42:VAL:CA | 1:A:42:VAL:C | 1 | 1.5 |
| (1,217) | 1:A:139:PHE:N | 1:A:139:PHE:CA | 1:A:139:PHE:C | 1:A:140:GLU:N | 5 | 1.5 |
| (1,207) | 1:A:120:LYS:N | 1:A:120:LYS:CA | 1:A:120:LYS:C | 1:A:121:ARG:N | 20 | 1.5 |
| (1,177) | 1:A:105:PHE:N | 1:A:105:PHE:CA | 1:A:105:PHE:C | 1:A:106:ASN:N | 1 | 1.5 |
| (1,177) | 1:A:105:PHE:N | 1:A:105:PHE:CA | 1:A:105:PHE:C | 1:A:106:ASN:N | 3 | 1.5 |
| (1,177) | 1:A:105:PHE:N | 1:A:105:PHE:CA | 1:A:105:PHE:C | 1:A:106:ASN:N | 20 | 1.5 |
| (1,169) | 1:A:101:ILE:N | 1:A:101:ILE:CA | 1:A:101:ILE:C | 1:A:102:TYR:N | 18 | 1.5 |
| (1,13) | 1:A:18:THR:N | 1:A:18:THR:CA | 1:A:18:THR:C | 1:A:19:ASN:N | 6 | 1.5 |
| (1,13) | 1:A:18:THR:N | 1:A:18:THR:CA | 1:A:18:THR:C | 1:A:19:ASN:N | 7 | 1.5 |
| (1,117) | 1:A:73:MET:N | 1:A:73:MET:CA | 1:A:73:MET:C | 1:A:74:ARG:N | 14 | 1.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,109) | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 1:A:70:VAL:N | 3 | 1.5 |
| (1,109) | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 1:A:70:VAL:N | 12 | 1.5 |
| (1,109) | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 1:A:70:VAL:N | 13 | 1.5 |
| (1,109) | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 1:A:70:VAL:N | 16 | 1.5 |
| (1,109) | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 1:A:70:VAL:N | 18 | 1.5 |
| (1,1) | 1:A:12:ALA:N | 1:A:12:ALA:CA | 1:A:12:ALA:C | 1:A:13:GLY:N | 15 | 1.5 |
| (1,80) | 1:A:53:ASP:C | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 6 | 1.4 |
| (1,8) | 1:A:14:LEU:C | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 17 | 1.4 |
| (1,79) | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 1:A:55:SER:N | 12 | 1.4 |
| (1,78) | 1:A:52:PHE:C | 1:A:53:ASP:N | 1:A:53:ASP:CA | 1:A:53:ASP:C | 16 | 1.4 |
| (1,59) | 1:A:43:LYS:N | 1:A:43:LYS:CA | 1:A:43:LYS:C | 1:A:44:ARG:N | 13 | 1.4 |
| (1,39) | 1:A:33:VAL:N | 1:A:33:VAL:CA | 1:A:33:VAL:C | 1:A:34:ASP:N | 20 | 1.4 |
| (1,35) | 1:A:31:GLU:N | 1:A:31:GLU:CA | 1:A:31:GLU:C | 1:A:32:LEU:N | 16 | 1.4 |
| (1,207) | 1:A:120:LYS:N | 1:A:120:LYS:CA | 1:A:120:LYS:C | 1:A:121:ARG:N | 15 | 1.4 |
| (1,204) | 1:A:117:ASP:C | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 6 | 1.4 |
| (1,204) | 1:A:117:ASP:C | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 16 | 1.4 |
| (1,204) | 1:A:117:ASP:C | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 20 | 1.4 |
| (1,18) | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 3 | 1.4 |
| (1,177) | 1:A:105:PHE:N | 1:A:105:PHE:CA | 1:A:105:PHE:C | 1:A:106:ASN:N | 10 | 1.4 |
| (1,168) | 1:A:99:GLU:C | 1:A:100:THR:N | 1:A:100:THR:CA | 1:A:100:THR:C | 2 | 1.4 |
| (1,160) | 1:A:95:ASN:C | 1:A:96:PRO:N | 1:A:96:PRO:CA | 1:A:96:PRO:C | 4 | 1.4 |
| (1,144) | 1:A:85:PHE:C | 1:A:86:ASN:N | 1:A:86:ASN:CA | 1:A:86:ASN:C | 4 | 1.4 |
| (1,135) | 1:A:82:VAL:N | 1:A:82:VAL:CA | 1:A:82:VAL:C | 1:A:83:VAL:N | 6 | 1.4 |
| (1,133) | 1:A:81:LYS:N | 1:A:81:LYS:CA | 1:A:81:LYS:C | 1:A:82:VAL:N | 20 | 1.4 |
| (1,13) | 1:A:18:THR:N | 1:A:18:THR:CA | 1:A:18:THR:C | 1:A:19:ASN:N | 1 | 1.4 |
| (1,13) | 1:A:18:THR:N | 1:A:18:THR:CA | 1:A:18:THR:C | 1:A:19:ASN:N | 15 | 1.4 |
| (1,126) | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 1:A:77:ILE:CA | 1:A:77:ILE:C | 13 | 1.4 |
| (1,117) | 1:A:73:MET:N | 1:A:73:MET:CA | 1:A:73:MET:C | 1:A:74:ARG:N | 7 | 1.4 |
| (1,117) | 1:A:73:MET:N | 1:A:73:MET:CA | 1:A:73:MET:C | 1:A:74:ARG:N | 20 | 1.4 |
| (1,111) | 1:A:70:VAL:N | 1:A:70:VAL:CA | 1:A:70:VAL:C | 1:A:71:ASN:N | 1 | 1.4 |
| (1,109) | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 1:A:70:VAL:N | 4 | 1.4 |
| (1,104) | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CA | 1:A:66:PHE:C | 1 | 1.4 |
| (1,104) | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CA | 1:A:66:PHE:C | 3 | 1.4 |
| (1,104) | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CA | 1:A:66:PHE:C | 5 | 1.4 |
| (1,104) | 1:A:65:ASP:C | 1:A:66:PHE:N | 1:A:66:PHE:CA | 1:A:66:PHE:C | 14 | 1.4 |
| (1,80) | 1:A:53:ASP:C | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 1 | 1.3 |
| (1,80) | 1:A:53:ASP:C | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 2 | 1.3 |
| (1,80) | 1:A:53:ASP:C | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 13 | 1.3 |
| (1,8) | 1:A:14:LEU:C | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 15 | 1.3 |
| (1,79) | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 1:A:55:SER:N | 11 | 1.3 |
| (1,79) | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 1:A:55:SER:N | 19 | 1.3 |
| (1,59) | 1:A:43:LYS:N | 1:A:43:LYS:CA | 1:A:43:LYS:C | 1:A:44:ARG:N | 1 | 1.3 |
| (1,59) | 1:A:43:LYS:N | 1:A:43:LYS:CA | 1:A:43:LYS:C | 1:A:44:ARG:N | 2 | 1.3 |
| (1,213) | 1:A:137:ASP:N | 1:A:137:ASP:CA | 1:A:137:ASP:C | 1:A:138:ILE:N | 9 | 1.3 |
| (1,205) | 1:A:119:LYS:N | 1:A:119:LYS:CA | 1:A:119:LYS:C | 1:A:120:LYS:N | 14 | 1.3 |
| (1,204) | 1:A:117:ASP:C | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 5 | 1.3 |
| (1,204) | 1:A:117:ASP:C | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 14 | 1.3 |
| (1,187) | 1:A:110:SER:N | 1:A:110:SER:CA | 1:A:110:SER:C | 1:A:111:ILE:N | 15 | 1.3 |
| (1,177) | 1:A:105:PHE:N | 1:A:105:PHE:CA | 1:A:105:PHE:C | 1:A:106:ASN:N | 17 | 1.3 |
| (1,160) | 1:A:95:ASN:C | 1:A:96:PRO:N | 1:A:96:PRO:CA | 1:A:96:PRO:C | 1 | 1.3 |
| (1,160) | 1:A:95:ASN:C | 1:A:96:PRO:N | 1:A:96:PRO:CA | 1:A:96:PRO:C | 16 | 1.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 11 | 1.3 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 18 | 1.3 |
| (1,139) | 1:A:84:ASN:N | 1:A:84:ASN:CA | 1:A:84:ASN:C | 1:A:85:PHE:N | 2 | 1.3 |
| (1,13) | 1:A:18:THR:N | 1:A:18:THR:CA | 1:A:18:THR:C | 1:A:19:ASN:N | 5 | 1.3 |
| (1,13) | 1:A:18:THR:N | 1:A:18:THR:CA | 1:A:18:THR:C | 1:A:19:ASN:N | 9 | 1.3 |
| (1,13) | 1:A:18:THR:N | 1:A:18:THR:CA | 1:A:18:THR:C | 1:A:19:ASN:N | 12 | 1.3 |
| (1,127) | 1:A:78:GLU:N | 1:A:78:GLU:CA | 1:A:78:GLU:C | 1:A:79:ASN:N | 15 | 1.3 |
| (1,126) | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 1:A:77:ILE:CA | 1:A:77:ILE:C | 6 | 1.3 |
| (1,126) | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 1:A:77:ILE:CA | 1:A:77:ILE:C | 14 | 1.3 |
| (1,117) | 1:A:73:MET:N | 1:A:73:MET:CA | 1:A:73:MET:C | 1:A:74:ARG:N | 12 | 1.3 |
| (1,110) | 1:A:68:THR:C | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 7 | 1.3 |
| (1,110) | 1:A:68:THR:C | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 14 | 1.3 |
| (1,109) | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 1:A:70:VAL:N | 9 | 1.3 |
| (1,109) | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 1:A:70:VAL:N | 20 | 1.3 |
| (1,1) | 1:A:12:ALA:N | 1:A:12:ALA:CA | 1:A:12:ALA:C | 1:A:13:GLY:N | 2 | 1.3 |
| (1,1) | 1:A:12:ALA:N | 1:A:12:ALA:CA | 1:A:12:ALA:C | 1:A:13:GLY:N | 3 | 1.3 |
| (1,80) | 1:A:53:ASP:C | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 9 | 1.2 |
| (1,79) | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 1:A:55:SER:N | 10 | 1.2 |
| (1,70) | 1:A:47:LYS:C | 1:A:48:ASN:N | 1:A:48:ASN:CA | 1:A:48:ASN:C | 20 | 1.2 |
| (1,42) | 1:A:33:VAL:C | 1:A:34:ASP:N | 1:A:34:ASP:CA | 1:A:34:ASP:C | 20 | 1.2 |
| (1,35) | 1:A:31:GLU:N | 1:A:31:GLU:CA | 1:A:31:GLU:C | 1:A:32:LEU:N | 10 | 1.2 |
| (1,22) | 1:A:21:LEU:C | 1:A:22:ASP:N | 1:A:22:ASP:CA | 1:A:22:ASP:C | 18 | 1.2 |
| (1,216) | 1:A:137:ASP:C | 1:A:138:ILE:N | 1:A:138:ILE:CA | 1:A:138:ILE:C | 5 | 1.2 |
| (1,208) | 1:A:119:LYS:C | 1:A:120:LYS:N | 1:A:120:LYS:CA | 1:A:120:LYS:C | 18 | 1.2 |
| (1,204) | 1:A:117:ASP:C | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 7 | 1.2 |
| (1,203) | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 1:A:119:LYS:N | 9 | 1.2 |
| (1,194) | 1:A:112:PHE:C | 1:A:113:ASN:N | 1:A:113:ASN:CA | 1:A:113:ASN:C | 11 | 1.2 |
| (1,18) | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 8 | 1.2 |
| (1,177) | 1:A:105:PHE:N | 1:A:105:PHE:CA | 1:A:105:PHE:C | 1:A:106:ASN:N | 12 | 1.2 |
| (1,177) | 1:A:105:PHE:N | 1:A:105:PHE:CA | 1:A:105:PHE:C | 1:A:106:ASN:N | 18 | 1.2 |
| (1,168) | 1:A:99:GLU:C | 1:A:100:THR:N | 1:A:100:THR:CA | 1:A:100:THR:C | 1 | 1.2 |
| (1,168) | 1:A:99:GLU:C | 1:A:100:THR:N | 1:A:100:THR:CA | 1:A:100:THR:C | 4 | 1.2 |
| (1,160) | 1:A:95:ASN:C | 1:A:96:PRO:N | 1:A:96:PRO:CA | 1:A:96:PRO:C | 14 | 1.2 |
| (1,160) | 1:A:95:ASN:C | 1:A:96:PRO:N | 1:A:96:PRO:CA | 1:A:96:PRO:C | 17 | 1.2 |
| (1,154) | 1:A:91:ASN:C | 1:A:92:CYS:N | 1:A:92:CYS:CA | 1:A:92:CYS:C | 12 | 1.2 |
| (1,15) | 1:A:19:ASN:N | 1:A:19:ASN:CA | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 13 | 1.2 |
| (1,13) | 1:A:18:THR:N | 1:A:18:THR:CA | 1:A:18:THR:C | 1:A:19:ASN:N | 8 | 1.2 |
| (1,126) | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 1:A:77:ILE:CA | 1:A:77:ILE:C | 15 | 1.2 |
| (1,123) | 1:A:76:LYS:N | 1:A:76:LYS:CA | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 13 | 1.2 |
| (1,117) | 1:A:73:MET:N | 1:A:73:MET:CA | 1:A:73:MET:C | 1:A:74:ARG:N | 18 | 1.2 |
| (1,110) | 1:A:68:THR:C | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 4 | 1.2 |
| (1,110) | 1:A:68:THR:C | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 8 | 1.2 |
| (1,1) | 1:A:12:ALA:N | 1:A:12:ALA:CA | 1:A:12:ALA:C | 1:A:13:GLY:N | 16 | 1.2 |
| (1,80) | 1:A:53:ASP:C | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 19 | 1.1 |
| (1,8) | 1:A:14:LEU:C | 1:A:15:LYS:N | 1:A:15:LYS:CA | 1:A:15:LYS:C | 4 | 1.1 |
| (1,79) | 1:A:54:LEU:N | 1:A:54:LEU:CA | 1:A:54:LEU:C | 1:A:55:SER:N | 3 | 1.1 |
| (1,59) | 1:A:43:LYS:N | 1:A:43:LYS:CA | 1:A:43:LYS:C | 1:A:44:ARG:N | 16 | 1.1 |
| (1,36) | 1:A:30:ASP:C | 1:A:31:GLU:N | 1:A:31:GLU:CA | 1:A:31:GLU:C | 13 | 1.1 |
| (1,3) | 1:A:13:GLY:N | 1:A:13:GLY:CA | 1:A:13:GLY:C | 1:A:14:LEU:N | 14 | 1.1 |
| (1,207) | 1:A:120:LYS:N | 1:A:120:LYS:CA | 1:A:120:LYS:C | 1:A:121:ARG:N | 2 | 1.1 |
| (1,205) | 1:A:119:LYS:N | 1:A:119:LYS:CA | 1:A:119:LYS:C | 1:A:120:LYS:N | 1 | 1.1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|---------|---------------|----------------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,204) | 1:A:117:ASP:C | 1:A:118:VAL:N | 1:A:118:VAL:CA | 1:A:118:VAL:C | 9 | 1.1 |
| (1,18) | 1:A:19:ASN:C | 1:A:20:LYS:N | 1:A:20:LYS:CA | 1:A:20:LYS:C | 10 | 1.1 |
| (1,177) | 1:A:105:PHE:N | 1:A:105:PHE:CA | 1:A:105:PHE:C | 1:A:106:ASN:N | 5 | 1.1 |
| (1,177) | 1:A:105:PHE:N | 1:A:105:PHE:CA | 1:A:105:PHE:C | 1:A:106:ASN:N | 8 | 1.1 |
| (1,177) | 1:A:105:PHE:N | 1:A:105:PHE:CA | 1:A:105:PHE:C | 1:A:106:ASN:N | 9 | 1.1 |
| (1,177) | 1:A:105:PHE:N | 1:A:105:PHE:CA | 1:A:105:PHE:C | 1:A:106:ASN:N | 14 | 1.1 |
| (1,168) | 1:A:99:GLU:C | 1:A:100:THR:N | 1:A:100:THR:CA | 1:A:100:THR:C | 11 | 1.1 |
| (1,144) | 1:A:85:PHE:C | 1:A:86:ASN:N | 1:A:86:ASN:CA | 1:A:86:ASN:C | 6 | 1.1 |
| (1,144) | 1:A:85:PHE:C | 1:A:86:ASN:N | 1:A:86:ASN:CA | 1:A:86:ASN:C | 12 | 1.1 |
| (1,144) | 1:A:85:PHE:C | 1:A:86:ASN:N | 1:A:86:ASN:CA | 1:A:86:ASN:C | 13 | 1.1 |
| (1,144) | 1:A:85:PHE:C | 1:A:86:ASN:N | 1:A:86:ASN:CA | 1:A:86:ASN:C | 14 | 1.1 |
| (1,135) | 1:A:82:VAL:N | 1:A:82:VAL:CA | 1:A:82:VAL:C | 1:A:83:VAL:N | 10 | 1.1 |
| (1,13) | 1:A:18:THR:N | 1:A:18:THR:CA | 1:A:18:THR:C | 1:A:19:ASN:N | 18 | 1.1 |
| (1,126) | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 1:A:77:ILE:CA | 1:A:77:ILE:C | 3 | 1.1 |
| (1,126) | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 1:A:77:ILE:CA | 1:A:77:ILE:C | 4 | 1.1 |
| (1,126) | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 1:A:77:ILE:CA | 1:A:77:ILE:C | 17 | 1.1 |
| (1,123) | 1:A:76:LYS:N | 1:A:76:LYS:CA | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 3 | 1.1 |
| (1,123) | 1:A:76:LYS:N | 1:A:76:LYS:CA | 1:A:76:LYS:C | 1:A:77:ILE:N | 8 | 1.1 |
| (1,117) | 1:A:73:MET:N | 1:A:73:MET:CA | 1:A:73:MET:C | 1:A:74:ARG:N | 11 | 1.1 |
| (1,109) | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 1:A:70:VAL:N | 7 | 1.1 |
| (1,109) | 1:A:69:LEU:N | 1:A:69:LEU:CA | 1:A:69:LEU:C | 1:A:70:VAL:N | 10 | 1.1 |
| (1,100) | 1:A:63:GLU:C | 1:A:64:ALA:N | 1:A:64:ALA:CA | 1:A:64:ALA:C | 3 | 1.1 |
| (1,100) | 1:A:63:GLU:C | 1:A:64:ALA:N | 1:A:64:ALA:CA | 1:A:64:ALA:C | 5 | 1.1 |
| (1,100) | 1:A:63:GLU:C | 1:A:64:ALA:N | 1:A:64:ALA:CA | 1:A:64:ALA:C | 6 | 1.1 |
| (1,1) | 1:A:12:ALA:N | 1:A:12:ALA:CA | 1:A:12:ALA:C | 1:A:13:GLY:N | 6 | 1.1 |