



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 3, 2023 – 10:06 AM EDT

PDB ID : 6COQ  
BMRB ID : 30429  
Title : CSP1-K6A  
Authors : Yang, Y.  
Deposited on : 2018-03-12

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto: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

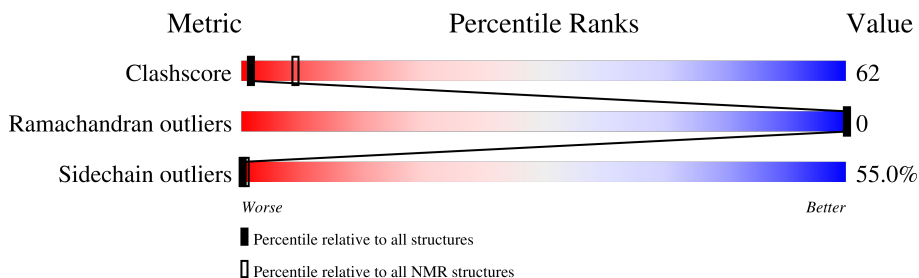
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment is 60%.

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  $\geq 3$ , 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     | 17     |                  |

## 2 Ensemble composition and analysis

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

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

| Well-defined (core) protein residues |                       |                   |              |
|--------------------------------------|-----------------------|-------------------|--------------|
| Well-defined core                    | Residue range (total) | Backbone RMSD (Å) | Medoid model |
| 1                                    | A:2-A:17 (16)         | 0.06              | 20           |

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

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

The models can be grouped into 2 clusters and 6 single-model clusters were found.

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

### 3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 318 atoms, of which 164 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Competence-stimulating peptide type 1.

| Mol | Chain | Residues | Atoms |     |     |    |    |   | Trace |
|-----|-------|----------|-------|-----|-----|----|----|---|-------|
|     |       |          | Total | C   | H   | N  | O  | S |       |
| 1   | A     | 17       | 318   | 100 | 164 | 29 | 24 | 1 | 0     |

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment             | Reference  |
|-------|---------|----------|--------|---------------------|------------|
| A     | 6       | ALA      | LYS    | engineered mutation | UNP P60242 |

## 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: Competence-stimulating peptide type 1



### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

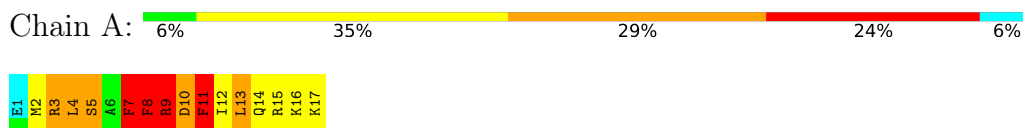
#### 4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1



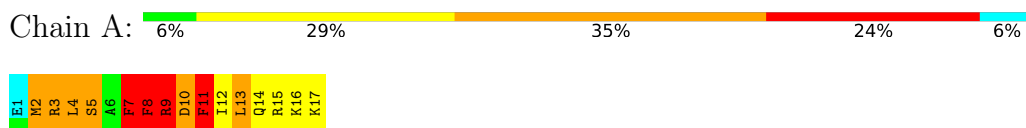
#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1



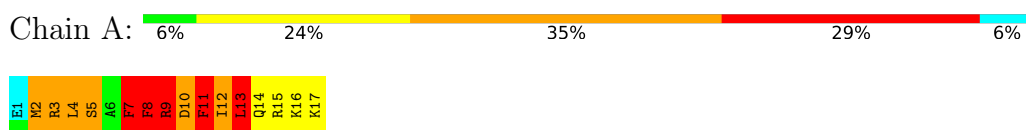
### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1



### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1



### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1



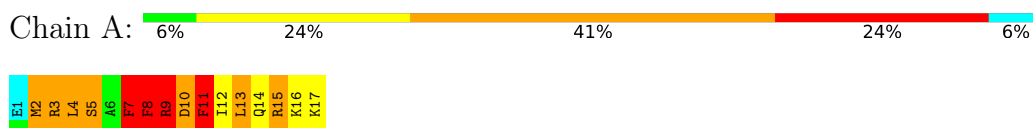
### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1



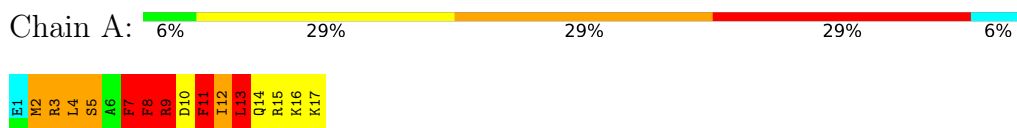
### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1



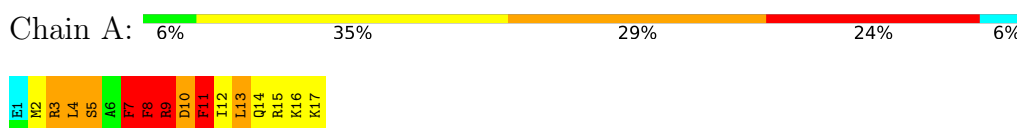
#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1



#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1



#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1



#### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1



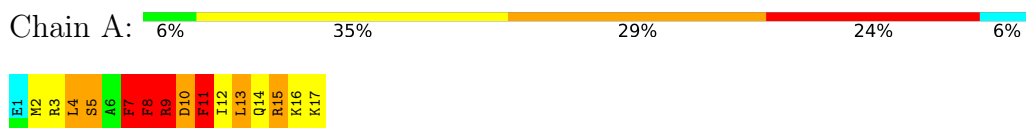
#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1



#### 4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1



#### 4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1



#### 4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1



#### 4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1



#### 4.2.17 Score per residue for model 17

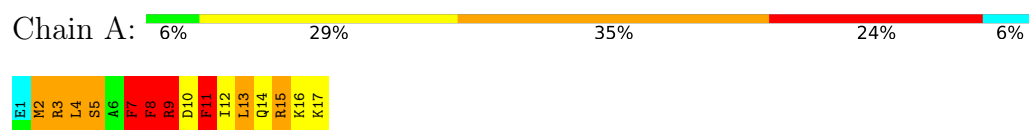
- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1





#### 4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1



#### 4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1



#### 4.2.20 Score per residue for model 20 (medoid)

- Molecule 1: Competence-stimulating peptide type 1



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 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 |
|---------------|-----------------------|---------|
| X-PLOR NIH    | refinement            |         |
| X-PLOR NIH    | 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                       | 162            |
| Number of shifts mapped to atoms             | 162            |
| Number of unparsed shifts                    | 0              |
| Number of shifts with mapping errors         | 0              |
| Number of shifts with mapping warnings       | 0              |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 60%            |

## 6 Model quality i

### 6.1 Standard geometry i

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

| Mol | Chain | Bond lengths |                       | Bond angles |                      |
|-----|-------|--------------|-----------------------|-------------|----------------------|
|     |       | RMSZ         | #Z>5                  | RMSZ        | #Z>5                 |
| 1   | A     | 2.67±0.01    | 11±1/147 ( 7.2± 0.5%) | 2.55±0.02   | 7±1/190 ( 3.6± 0.3%) |
| All | All   | 2.67         | 211/2940 ( 7.2%)      | 2.55        | 137/3800 ( 3.6%)     |

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

| Mol | Chain | Chirality | Planarity |
|-----|-------|-----------|-----------|
| 1   | A     | 0.0±0.0   | 1.0±0.0   |
| All | All   | 0         | 20        |

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

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms   | Z     | Observed(Å) | Ideal(Å) | Models |       |
|-----|-------|-----|------|---------|-------|-------------|----------|--------|-------|
|     |       |     |      |         |       |             |          | Worst  | Total |
| 1   | A     | 11  | PHE  | CD2-CE2 | -8.44 | 1.22        | 1.39     | 6      | 20    |
| 1   | A     | 13  | LEU  | N-CA    | -6.78 | 1.32        | 1.46     | 8      | 20    |
| 1   | A     | 7   | PHE  | CG-CD1  | -6.47 | 1.29        | 1.38     | 8      | 20    |
| 1   | A     | 7   | PHE  | CD1-CE1 | -6.43 | 1.26        | 1.39     | 11     | 20    |
| 1   | A     | 11  | PHE  | CG-CD2  | -6.21 | 1.29        | 1.38     | 4      | 20    |
| 1   | A     | 7   | PHE  | CD2-CE2 | -5.86 | 1.27        | 1.39     | 4      | 20    |
| 1   | A     | 9   | ARG  | NE-CZ   | 5.62  | 1.40        | 1.33     | 13     | 20    |
| 1   | A     | 12  | ILE  | CA-C    | -5.60 | 1.38        | 1.52     | 8      | 2     |
| 1   | A     | 3   | ARG  | NE-CZ   | 5.23  | 1.39        | 1.33     | 12     | 19    |
| 1   | A     | 11  | PHE  | CA-C    | -5.21 | 1.39        | 1.52     | 1      | 18    |
| 1   | A     | 4   | LEU  | N-CA    | -5.19 | 1.35        | 1.46     | 4      | 20    |
| 1   | A     | 15  | ARG  | NE-CZ   | 5.07  | 1.39        | 1.33     | 20     | 9     |
| 1   | A     | 8   | PHE  | CD1-CE1 | -5.01 | 1.29        | 1.39     | 11     | 3     |

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

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms      | Z      | Observed( $^{\circ}$ ) | Ideal( $^{\circ}$ ) | Models |       |
|-----|-------|-----|------|------------|--------|------------------------|---------------------|--------|-------|
|     |       |     |      |            |        |                        |                     | Worst  | Total |
| 1   | A     | 11  | PHE  | CB-CG-CD2  | -14.24 | 110.83                 | 120.80              | 4      | 20    |
| 1   | A     | 11  | PHE  | CB-CG-CD1  | 12.92  | 129.84                 | 120.80              | 4      | 20    |
| 1   | A     | 7   | PHE  | CB-CG-CD2  | -12.39 | 112.13                 | 120.80              | 8      | 20    |
| 1   | A     | 8   | PHE  | CB-CG-CD1  | -7.97  | 115.22                 | 120.80              | 15     | 20    |
| 1   | A     | 11  | PHE  | CG-CD2-CE2 | 6.30   | 127.73                 | 120.80              | 1      | 20    |
| 1   | A     | 2   | MET  | CB-CA-C    | -6.21  | 97.97                  | 110.40              | 9      | 1     |
| 1   | A     | 13  | LEU  | CB-CA-C    | 6.04   | 121.67                 | 110.20              | 4      | 2     |
| 1   | A     | 5   | SER  | CB-CA-C    | 5.96   | 121.42                 | 110.10              | 17     | 20    |
| 1   | A     | 9   | ARG  | N-CA-CB    | 5.23   | 120.01                 | 110.60              | 8      | 14    |

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

| Mol | Chain | Res | Type | Group     | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|-----------|----------------|
| 1   | A     | 7   | PHE  | Sidechain | 20             |

## 6.2 Too-close contacts [i](#)

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

| Mol | Chain | Non-H | H(model) | H(added) | Clashes    |
|-----|-------|-------|----------|----------|------------|
| 1   | A     | 145   | 156      | 156      | 19 $\pm$ 1 |
| All | All   | 2900  | 3120     | 3120     | 371        |

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 62.

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

| Atom-1        | Atom-2          | Clash( $\text{\AA}$ ) | Distance( $\text{\AA}$ ) | Models |       |
|---------------|-----------------|-----------------------|--------------------------|--------|-------|
|               |                 |                       |                          | Worst  | Total |
| 1:A:7:PHE:CE1 | 1:A:11:PHE:HB3  | 0.80                  | 2.12                     | 4      | 20    |
| 1:A:7:PHE:O   | 1:A:7:PHE:CD1   | 0.77                  | 2.38                     | 15     | 20    |
| 1:A:7:PHE:CD1 | 1:A:7:PHE:C     | 0.75                  | 2.59                     | 5      | 20    |
| 1:A:5:SER:HA  | 1:A:8:PHE:HB2   | 0.75                  | 1.59                     | 4      | 20    |
| 1:A:7:PHE:CD1 | 1:A:11:PHE:HB3  | 0.73                  | 2.17                     | 12     | 20    |
| 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:HD22 | 0.68                  | 1.88                     | 15     | 20    |
| 1:A:4:LEU:O   | 1:A:7:PHE:CD2   | 0.67                  | 2.48                     | 3      | 20    |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1          | Atom-2          | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|-----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
|                 |                 |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:7:PHE:CE1   | 1:A:11:PHE:HD2  | 0.61     | 2.13        | 13     | 20    |
| 1:A:11:PHE:O    | 1:A:15:ARG:HG3  | 0.61     | 1.94        | 15     | 20    |
| 1:A:7:PHE:CE1   | 1:A:11:PHE:CD2  | 0.60     | 2.90        | 15     | 20    |
| 1:A:4:LEU:HG    | 1:A:5:SER:N     | 0.58     | 2.14        | 14     | 20    |
| 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:HB   | 0.55     | 2.01        | 18     | 20    |
| 1:A:10:ASP:O    | 1:A:14:GLN:HG2  | 0.54     | 2.03        | 11     | 19    |
| 1:A:9:ARG:O     | 1:A:13:LEU:HD13 | 0.49     | 2.07        | 19     | 18    |
| 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:5:SER:HB3   | 0.48     | 1.86        | 17     | 19    |
| 1:A:4:LEU:O     | 1:A:7:PHE:CE2   | 0.46     | 2.68        | 5      | 20    |
| 1:A:5:SER:CA    | 1:A:8:PHE:HB2   | 0.45     | 2.37        | 4      | 17    |
| 1:A:7:PHE:O     | 1:A:10:ASP:N    | 0.43     | 2.38        | 15     | 14    |
| 1:A:8:PHE:HA    | 1:A:12:ILE:HD13 | 0.43     | 1.90        | 8      | 2     |
| 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:N    | 0.42     | 2.30        | 8      | 2     |
| 1:A:7:PHE:O     | 1:A:9:ARG:N     | 0.41     | 2.54        | 9      | 18    |
| 1:A:7:PHE:CE1   | 1:A:7:PHE:O     | 0.41     | 2.72        | 4      | 2     |

## 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     | 15/17 (88%)   | 13±0 (87±0%) | 2±0 (13±0%) | 0±0 (0±0%) | 100         | 100 |
| All | All   | 300/340 (88%) | 260 (87%)    | 40 (13%)    | 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     | 15/16 (94%)   | 7±1 (45±6%) | 8±1 (55±6%) | <b>0</b> <b>1</b> |
| All | All   | 300/320 (94%) | 135 (45%)   | 165 (55%)   | <b>0</b> <b>1</b> |

All 10 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     | 7   | PHE  | 20             |
| 1   | A     | 8   | PHE  | 20             |
| 1   | A     | 9   | ARG  | 20             |
| 1   | A     | 11  | PHE  | 20             |
| 1   | A     | 16  | LYS  | 20             |
| 1   | A     | 17  | LYS  | 20             |
| 1   | A     | 3   | ARG  | 18             |
| 1   | A     | 2   | MET  | 13             |
| 1   | A     | 10  | ASP  | 12             |
| 1   | A     | 13  | LEU  | 2              |

### 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

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 60% for the well-defined parts and 58% for the entire structure.

### 7.1 Chemical shift list 1

File name: working\_cs.cif

Chemical shift list name: *shiftFile\_1*

#### 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                  | 162 |
| Number of shifts mapped to atoms        | 162 |
| 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](#)

No chemical shift referencing corrections were calculated (not enough data).

#### 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 60%, i.e. 162 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 269. 0 out of 2 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

|           | Total         | <sup>1</sup> H | <sup>13</sup> C | <sup>15</sup> N |
|-----------|---------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone  | 62/80 (78%)   | 32/32 (100%)   | 15/32 (47%)     | 15/16 (94%)     |
| Sidechain | 93/159 (58%)  | 74/102 (73%)   | 15/45 (33%)     | 4/12 (33%)      |
| Aromatic  | 7/30 (23%)    | 7/15 (47%)     | 0/15 (0%)       | 0/0 (—%)        |
| Overall   | 162/269 (60%) | 113/149 (76%)  | 30/92 (33%)     | 19/28 (68%)     |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 58%, i.e. 162 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 281. 0 out of 2 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.



|           | Total         | <sup>1</sup> H | <sup>13</sup> C | <sup>15</sup> N |
|-----------|---------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone  | 62/85 (73%)   | 32/34 (94%)    | 15/34 (44%)     | 15/17 (88%)     |
| Sidechain | 93/166 (56%)  | 74/106 (70%)   | 15/48 (31%)     | 4/12 (33%)      |
| Aromatic  | 7/30 (23%)    | 7/15 (47%)     | 0/15 (0%)       | 0/0 (—%)        |
| Overall   | 162/281 (58%) | 113/155 (73%)  | 30/97 (31%)     | 19/29 (66%)     |

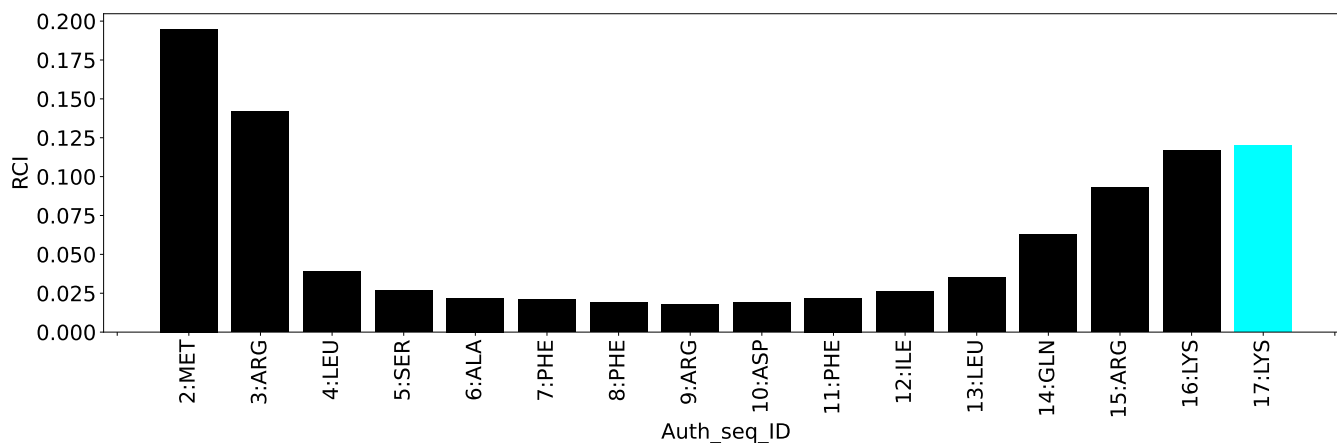
### 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

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                                | 805   |
| Intra-residue ( $ i-j =0$ )                              | 200   |
| Sequential ( $ i-j =1$ )                                 | 207   |
| Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )                 | 341   |
| Long range ( $ i-j \geq 5$ )                             | 45    |
| Inter-chain  | 0     |
| Hydrogen bond restraints                                 | 12    |
| Disulfide bond restraints                                | 0     |
| Total dihedral-angle restraints                          | 28    |
| Number of unmapped restraints                            | 0     |
| Number of restraints per residue                         | 49.0  |
| Number of long range restraints per residue <sup>1</sup> | 2.6   |

<sup>1</sup>Long 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)  | 47.2                                   | 0.2     |
| 0.2-0.5 (Medium) | 309.6                                  | 0.5     |
| >0.5 (Large)     | 46.6                                   | 1.28    |

### 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)   | 7.2                                    | 9.3     |
| 10.0-20.0 (Medium) | 5.0                                    | 19.3    |
| >20.0 (Large)      | 4.0                                    | 29.2    |

## 9 Distance violation analysis i

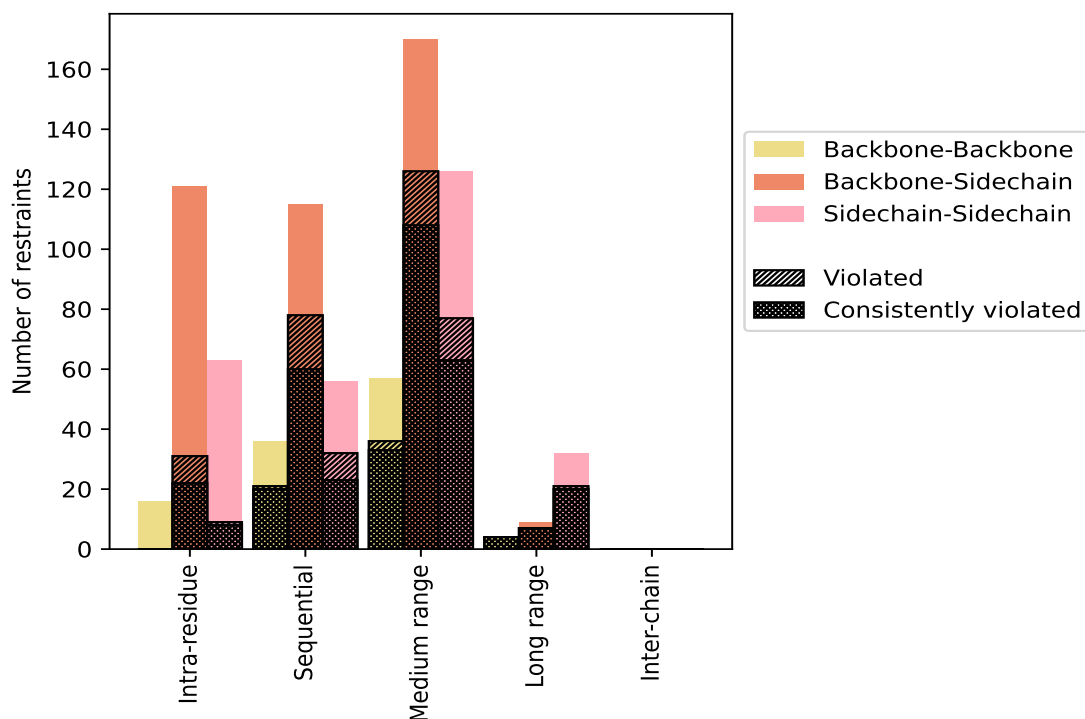
### 9.1 Summary of distance violations i

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      | % <sup>1</sup> | Violated <sup>3</sup> |                |                | Consistently Violated <sup>4</sup> |                |                |
|---|------------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
|   |            |                | Count                 | % <sup>2</sup> | % <sup>1</sup> | Count                              | % <sup>2</sup> | % <sup>1</sup> |
| <b>Intra-residue (<math> i-j =0</math>)</b>                                 | <b>200</b> | <b>24.8</b>    | <b>40</b>             | <b>20.0</b>    | <b>5.0</b>     | <b>30</b>                          | <b>15.0</b>    | <b>3.7</b>     |
| Backbone-Backbone   | 16         | 2.0            | 0                     | 0.0            | 0.0            | 0                                  | 0.0            | 0.0            |
| Backbone-Sidechain  | 121        | 15.0           | 31                    | 25.6           | 3.9            | 22                                 | 18.2           | 2.7            |
| Sidechain-Sidechain   | 63         | 7.8            | 9                     | 14.3           | 1.1            | 8                                  | 12.7           | 1.0            |
| <b>Sequential (<math> i-j =1</math>)</b>                                    | <b>207</b> | <b>25.7</b>    | <b>131</b>            | <b>63.3</b>    | <b>16.3</b>    | <b>103</b>                         | <b>49.8</b>    | <b>12.8</b>    |
| Backbone-Backbone   | 36         | 4.5            | 21                    | 58.3           | 2.6            | 20                                 | 55.6           | 2.5            |
| Backbone-Sidechain  | 115        | 14.3           | 78                    | 67.8           | 9.7            | 60                                 | 52.2           | 7.5            |
| Sidechain-Sidechain   | 56         | 7.0            | 32                    | 57.1           | 4.0            | 23                                 | 41.1           | 2.9            |
| <b>Medium range (<math> i-j &gt;1</math> &amp; <math> i-j &lt;5</math>)</b> | <b>341</b> | <b>42.4</b>    | <b>231</b>            | <b>67.7</b>    | <b>28.7</b>    | <b>197</b>                         | <b>57.8</b>    | <b>24.5</b>    |
| Backbone-Backbone   | 45         | 5.6            | 28                    | 62.2           | 3.5            | 26                                 | 57.8           | 3.2            |
| Backbone-Sidechain  | 170        | 21.1           | 126                   | 74.1           | 15.7           | 108                                | 63.5           | 13.4           |
| Sidechain-Sidechain   | 126        | 15.7           | 77                    | 61.1           | 9.6            | 63                                 | 50.0           | 7.8            |
| <b>Long range (<math> i-j \geq 5</math>)</b>                                | <b>45</b>  | <b>5.6</b>     | <b>32</b>             | <b>71.1</b>    | <b>4.0</b>     | <b>31</b>                          | <b>68.9</b>    | <b>3.9</b>     |
| Backbone-Backbone   | 4          | 0.5            | 4                     | 100.0          | 0.5            | 4                                  | 100.0          | 0.5            |
| Backbone-Sidechain  | 9          | 1.1            | 7                     | 77.8           | 0.9            | 7                                  | 77.8           | 0.9            |
| Sidechain-Sidechain   | 32         | 4.0            | 21                    | 65.6           | 2.6            | 20                                 | 62.5           | 2.5            |
| <b>Inter-chain</b>  | <b>0</b>   | <b>0.0</b>     | <b>0</b>              | <b>0.0</b>     | <b>0.0</b>     | <b>0</b>                           | <b>0.0</b>     | <b>0.0</b>     |
| 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            |
| <b>Hydrogen bond</b>  | <b>12</b>  | <b>1.5</b>     | <b>8</b>              | <b>66.7</b>    | <b>1.0</b>     | <b>7</b>                           | <b>58.3</b>    | <b>0.9</b>     |
| <b>Disulfide bond</b>   | <b>0</b>   | <b>0.0</b>     | <b>0</b>              | <b>0.0</b>     | <b>0.0</b>     | <b>0</b>                           | <b>0.0</b>     | <b>0.0</b>     |
| <b>Total</b>  | <b>805</b> | <b>100.0</b>   | <b>442</b>            | <b>54.9</b>    | <b>54.9</b>    | <b>368</b>                         | <b>45.7</b>    | <b>45.7</b>    |
| Backbone-Backbone   | 113        | 14.0           | 61                    | 54.0           | 7.6            | 57                                 | 50.4           | 7.1            |
| Backbone-Sidechain  | 415        | 51.6           | 242                   | 58.3           | 30.1           | 197                                | 47.5           | 24.5           |
| Sidechain-Sidechain   | 277        | 34.4           | 139                   | 50.2           | 17.3           | 114                                | 41.2           | 14.2           |

<sup>1</sup> percentage calculated with respect to the total number of distance restraints, <sup>2</sup> percentage calculated with respect to the number of restraints in a particular restraint category, <sup>3</sup> violated in at least one model, <sup>4</sup> 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 disulfied 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 <sup>6</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
|          | IR <sup>1</sup>      | SQ <sup>2</sup> | MR <sup>3</sup> | LR <sup>4</sup> | IC <sup>5</sup> |       |          |         |                     |            |
| 1        | 34                   | 114             | 223             | 32              | 0               | 403   | 0.38     | 1.24    | 0.13                | 0.4        |
| 2        | 34                   | 115             | 223             | 32              | 0               | 404   | 0.38     | 1.24    | 0.13                | 0.4        |
| 3        | 33                   | 115             | 223             | 32              | 0               | 403   | 0.38     | 1.24    | 0.13                | 0.4        |
| 4        | 36                   | 114             | 227             | 31              | 0               | 408   | 0.38     | 1.21    | 0.13                | 0.39       |
| 5        | 31                   | 115             | 223             | 32              | 0               | 401   | 0.38     | 1.24    | 0.13                | 0.4        |
| 6        | 34                   | 115             | 223             | 32              | 0               | 404   | 0.38     | 1.23    | 0.13                | 0.4        |
| 7        | 34                   | 115             | 223             | 32              | 0               | 404   | 0.38     | 1.24    | 0.13                | 0.4        |
| 8        | 36                   | 114             | 226             | 31              | 0               | 407   | 0.38     | 1.21    | 0.13                | 0.39       |
| 9        | 31                   | 118             | 219             | 32              | 0               | 400   | 0.38     | 1.28    | 0.15                | 0.4        |
| 10       | 34                   | 114             | 223             | 32              | 0               | 403   | 0.38     | 1.23    | 0.13                | 0.4        |
| 11       | 35                   | 116             | 222             | 32              | 0               | 405   | 0.38     | 1.24    | 0.14                | 0.39       |

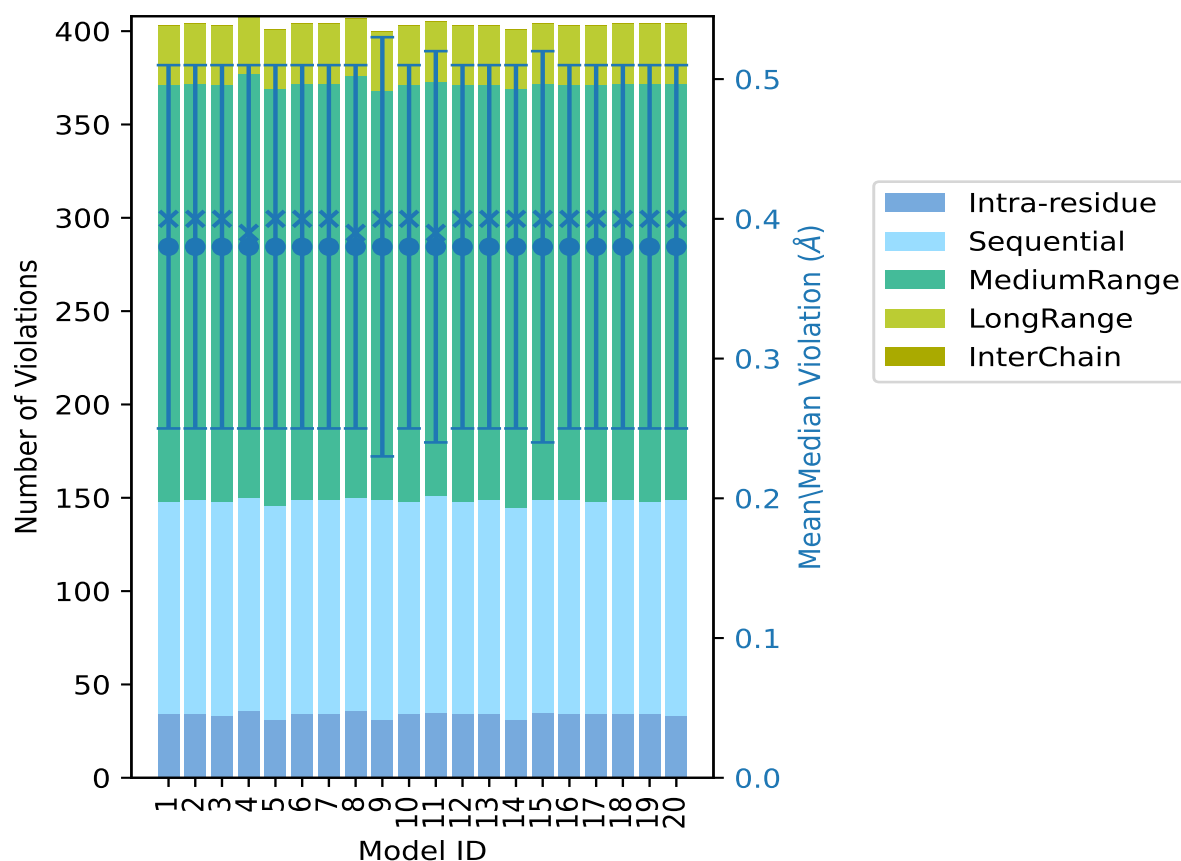
*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Model ID | Number of violations |                 |                 |                 |                 | Total | Mean (Å) | Max (Å) | SD <sup>6</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
|          | IR <sup>1</sup>      | SQ <sup>2</sup> | MR <sup>3</sup> | LR <sup>4</sup> | IC <sup>5</sup> |       |          |         |                     |            |
| 12       | 34                   | 114             | 223             | 32              | 0               | 403   | 0.38     | 1.24    | 0.13                | 0.4        |
| 13       | 34                   | 115             | 222             | 32              | 0               | 403   | 0.38     | 1.23    | 0.13                | 0.4        |
| 14       | 31                   | 114             | 224             | 32              | 0               | 401   | 0.38     | 1.23    | 0.13                | 0.4        |
| 15       | 35                   | 114             | 223             | 32              | 0               | 404   | 0.38     | 1.22    | 0.14                | 0.4        |
| 16       | 34                   | 115             | 222             | 32              | 0               | 403   | 0.38     | 1.23    | 0.13                | 0.4        |
| 17       | 34                   | 114             | 223             | 32              | 0               | 403   | 0.38     | 1.23    | 0.13                | 0.4        |
| 18       | 34                   | 115             | 223             | 32              | 0               | 404   | 0.38     | 1.23    | 0.13                | 0.4        |
| 19       | 34                   | 114             | 224             | 32              | 0               | 404   | 0.38     | 1.23    | 0.13                | 0.4        |
| 20       | 33                   | 116             | 223             | 32              | 0               | 404   | 0.38     | 1.24    | 0.13                | 0.4        |

<sup>1</sup>Intra-residue restraints, <sup>2</sup>Sequential restraints, <sup>3</sup>Medium range restraints, <sup>4</sup>Long range restraints, <sup>5</sup>Inter-chain restraints, <sup>6</sup>Standard 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

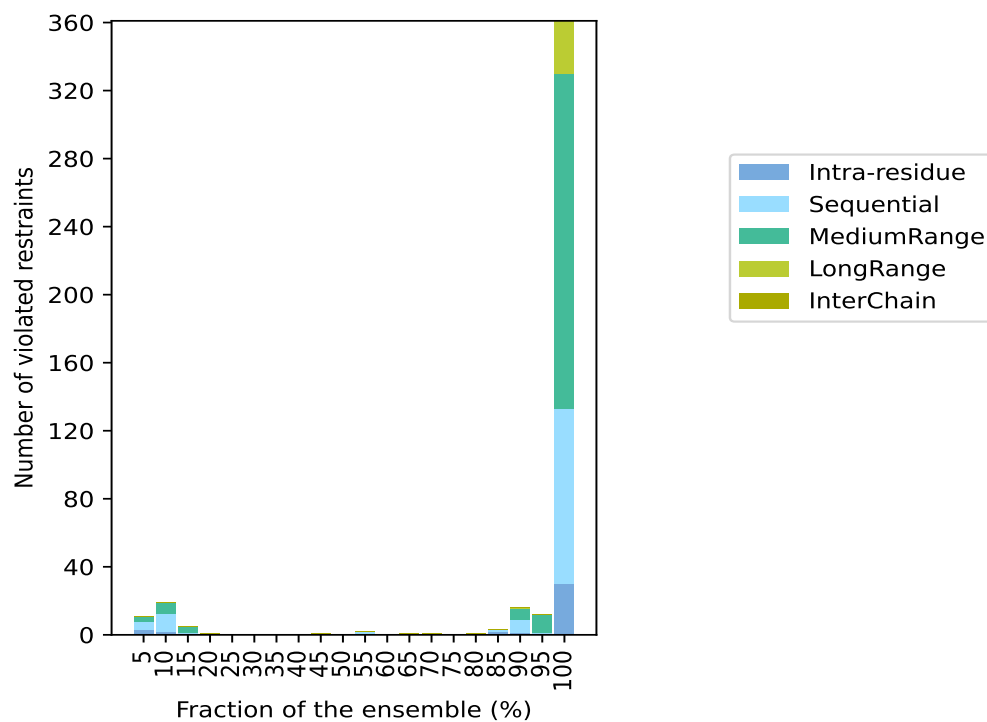
### 9.3 Distance violation statistics for the ensemble

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, 359(IR:160, SQ:76, MR:110, LR:13, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

| Number of violated restraints |                 |                 |                 |                 |       | Fraction of the ensemble |       |
|-------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|--------------------------|-------|
| IR <sup>1</sup>               | SQ <sup>2</sup> | MR <sup>3</sup> | LR <sup>4</sup> | IC <sup>5</sup> | Total | Count <sup>6</sup>       | %     |
| 3                             | 5               | 3               | 0               | 0               | 11    | 1                        | 5.0   |
| 2                             | 10              | 7               | 0               | 0               | 19    | 2                        | 10.0  |
| 1                             | 0               | 4               | 0               | 0               | 5     | 3                        | 15.0  |
| 0                             | 0               | 1               | 0               | 0               | 1     | 4                        | 20.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 5                        | 25.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 6                        | 30.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 7                        | 35.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 8                        | 40.0  |
| 0                             | 1               | 0               | 0               | 0               | 1     | 9                        | 45.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 10                       | 50.0  |
| 0                             | 2               | 0               | 0               | 0               | 2     | 11                       | 55.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 12                       | 60.0  |
| 1                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 1     | 13                       | 65.0  |
| 0                             | 0               | 1               | 0               | 0               | 1     | 14                       | 70.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 15                       | 75.0  |
| 0                             | 0               | 1               | 0               | 0               | 1     | 16                       | 80.0  |
| 2                             | 1               | 0               | 0               | 0               | 3     | 17                       | 85.0  |
| 1                             | 8               | 6               | 1               | 0               | 16    | 18                       | 90.0  |
| 0                             | 1               | 11              | 0               | 0               | 12    | 19                       | 95.0  |
| 30                            | 103             | 197             | 31              | 0               | 361   | 20                       | 100.0 |

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

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

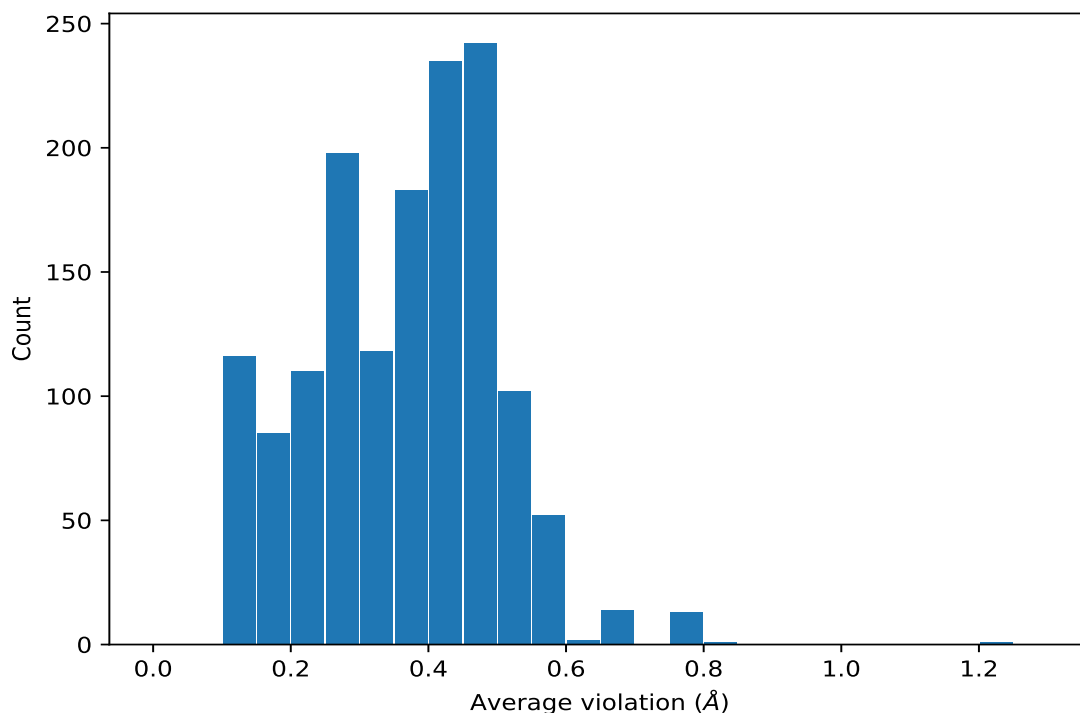


## 9.4 Most violated distance restraints in the ensemble [i](#)

### 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 <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (3,1)   | 1:A:6:ALA:O    | 1:A:10:ASP:H   | 20                  | 1.23     | 0.01                | 1.23       |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O    | 1:A:12:ILE:H   | 20                  | 0.84     | 0.01                | 0.84       |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:14:GLN:H   | 20                  | 0.7      | 0.09                | 0.73       |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O    | 1:A:13:LEU:H   | 20                  | 0.65     | 0.03                | 0.66       |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:H   | 20                  | 0.61     | 0.15                | 0.66       |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB  | 1:A:13:LEU:HA  | 20                  | 0.61     | 0.04                | 0.62       |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O    | 1:A:10:ASP:N   | 20                  | 0.6      | 0.01                | 0.6        |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HA  | 20                  | 0.6      | 0.07                | 0.62       |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HB2 | 20                  | 0.58     | 0.08                | 0.61       |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HB3 | 20                  | 0.58     | 0.08                | 0.61       |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:9:ARG:HA   | 20                  | 0.58     | 0.03                | 0.57       |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:9:ARG:HA   | 20                  | 0.58     | 0.03                | 0.57       |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 20                  | 0.58     | 0.04                | 0.58       |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 20                  | 0.58     | 0.04                | 0.58       |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD2 | 20                  | 0.56     | 0.01                | 0.56       |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD3 | 20                  | 0.56     | 0.01                | 0.56       |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:13:LEU:HA   | 20                  | 0.56     | 0.04                | 0.57       |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:13:LEU:HA   | 20                  | 0.56     | 0.04                | 0.57       |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:13:LEU:HD11 | 20                  | 0.56     | 0.07                | 0.58       |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:13:LEU:HD12 | 20                  | 0.56     | 0.07                | 0.58       |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:13:LEU:HD13 | 20                  | 0.56     | 0.07                | 0.58       |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:13:LEU:HD21 | 20                  | 0.56     | 0.07                | 0.58       |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:13:LEU:HD22 | 20                  | 0.56     | 0.07                | 0.58       |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:13:LEU:HD23 | 20                  | 0.56     | 0.07                | 0.58       |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:13:LEU:HD11 | 20                  | 0.56     | 0.07                | 0.58       |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:13:LEU:HD12 | 20                  | 0.56     | 0.07                | 0.58       |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:13:LEU:HD13 | 20                  | 0.56     | 0.07                | 0.58       |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:13:LEU:HD21 | 20                  | 0.56     | 0.07                | 0.58       |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:13:LEU:HD22 | 20                  | 0.56     | 0.07                | 0.58       |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:13:LEU:HD23 | 20                  | 0.56     | 0.07                | 0.58       |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:13:LEU:HD11 | 20                  | 0.55     | 0.01                | 0.55       |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:13:LEU:HD12 | 20                  | 0.55     | 0.01                | 0.55       |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:13:LEU:HD13 | 20                  | 0.55     | 0.01                | 0.55       |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:13:LEU:HD21 | 20                  | 0.55     | 0.01                | 0.55       |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:13:LEU:HD22 | 20                  | 0.55     | 0.01                | 0.55       |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:13:LEU:HD23 | 20                  | 0.55     | 0.01                | 0.55       |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1   | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.55     | 0.0                 | 0.55       |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1   | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.55     | 0.0                 | 0.55       |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2   | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.55     | 0.0                 | 0.55       |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2   | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.55     | 0.0                 | 0.55       |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:11:PHE:HA   | 20                  | 0.55     | 0.0                 | 0.55       |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG2  | 20                  | 0.55     | 0.01                | 0.55       |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG3  | 20                  | 0.55     | 0.01                | 0.55       |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG2  | 20                  | 0.55     | 0.01                | 0.55       |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG3  | 20                  | 0.55     | 0.01                | 0.55       |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG2  | 20                  | 0.55     | 0.01                | 0.55       |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG3  | 20                  | 0.55     | 0.01                | 0.55       |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG2  | 20                  | 0.55     | 0.01                | 0.55       |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG3  | 20                  | 0.55     | 0.01                | 0.55       |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:13:LEU:HA   | 20                  | 0.55     | 0.01                | 0.55       |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:4:LEU:HG    | 20                  | 0.54     | 0.06                | 0.56       |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1   | 1:A:10:ASP:HB2  | 20                  | 0.54     | 0.02                | 0.55       |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1   | 1:A:10:ASP:HB3  | 20                  | 0.54     | 0.02                | 0.55       |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2   | 1:A:10:ASP:HB2  | 20                  | 0.54     | 0.02                | 0.55       |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2   | 1:A:10:ASP:HB3  | 20                  | 0.54     | 0.02                | 0.55       |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3   | 1:A:10:ASP:HB2  | 20                  | 0.54     | 0.02                | 0.55       |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3   | 1:A:10:ASP:HB3  | 20                  | 0.54     | 0.02                | 0.55       |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.54     | 0.02                | 0.54       |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.54     | 0.02                | 0.54       |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.54     | 0.02                | 0.54       |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.54     | 0.02                | 0.54       |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.54     | 0.02                | 0.54       |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.54     | 0.02                | 0.54       |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.54     | 0.02                | 0.54       |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.54     | 0.02                | 0.54       |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.54     | 0.02                | 0.54       |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.54     | 0.02                | 0.54       |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.54     | 0.02                | 0.54       |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.54     | 0.02                | 0.54       |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA   | 20                  | 0.54     | 0.04                | 0.55       |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA   | 20                  | 0.54     | 0.04                | 0.55       |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA   | 20                  | 0.54     | 0.04                | 0.55       |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:10:ASP:H    | 20                  | 0.53     | 0.03                | 0.52       |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:10:ASP:H    | 20                  | 0.53     | 0.03                | 0.52       |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB2  | 20                  | 0.53     | 0.02                | 0.54       |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB3  | 20                  | 0.53     | 0.02                | 0.54       |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:13:LEU:HD11 | 20                  | 0.53     | 0.12                | 0.57       |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:13:LEU:HD12 | 20                  | 0.53     | 0.12                | 0.57       |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:13:LEU:HD13 | 20                  | 0.53     | 0.12                | 0.57       |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:13:LEU:HD21 | 20                  | 0.53     | 0.12                | 0.57       |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:13:LEU:HD22 | 20                  | 0.53     | 0.12                | 0.57       |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:13:LEU:HD23 | 20                  | 0.53     | 0.12                | 0.57       |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2   | 1:A:13:LEU:HD11 | 20                  | 0.53     | 0.12                | 0.57       |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2   | 1:A:13:LEU:HD12 | 20                  | 0.53     | 0.12                | 0.57       |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2   | 1:A:13:LEU:HD13 | 20                  | 0.53     | 0.12                | 0.57       |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2   | 1:A:13:LEU:HD21 | 20                  | 0.53     | 0.12                | 0.57       |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2   | 1:A:13:LEU:HD22 | 20                  | 0.53     | 0.12                | 0.57       |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2   | 1:A:13:LEU:HD23 | 20                  | 0.53     | 0.12                | 0.57       |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:11:PHE:HA   | 20                  | 0.52     | 0.0                 | 0.52       |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:11:PHE:HA   | 20                  | 0.52     | 0.0                 | 0.52       |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1   | 1:A:10:ASP:H    | 20                  | 0.52     | 0.01                | 0.52       |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2   | 1:A:10:ASP:H    | 20                  | 0.52     | 0.01                | 0.52       |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:11:PHE:HE1  | 20                  | 0.52     | 0.01                | 0.52       |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:11:PHE:HE2  | 20                  | 0.52     | 0.01                | 0.52       |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2   | 1:A:7:PHE:HA    | 20                  | 0.52     | 0.01                | 0.52       |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3   | 1:A:7:PHE:HA    | 20                  | 0.52     | 0.01                | 0.52       |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:H    | 20                  | 0.52     | 0.02                | 0.51       |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HE    | 20                  | 0.52     | 0.08                | 0.5        |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:9:ARG:HA    | 20                  | 0.51     | 0.02                | 0.51       |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:9:ARG:HA    | 20                  | 0.51     | 0.02                | 0.51       |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:14:GLN:HG2  | 20                  | 0.51     | 0.11                | 0.5        |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:14:GLN:HG3  | 20                  | 0.51     | 0.11                | 0.5        |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG2  | 20                  | 0.51     | 0.01                | 0.51       |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG3  | 20                  | 0.51     | 0.01                | 0.51       |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HD1   | 20                  | 0.51     | 0.0                 | 0.51       |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HD2   | 20                  | 0.51     | 0.0                 | 0.51       |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:11:PHE:H    | 20                  | 0.51     | 0.01                | 0.51       |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HD11 | 20                  | 0.5      | 0.04                | 0.49       |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HD12 | 20                  | 0.5      | 0.04                | 0.49       |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HD13 | 20                  | 0.5      | 0.04                | 0.49       |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HD21 | 20                  | 0.5      | 0.04                | 0.49       |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HD22 | 20                  | 0.5      | 0.04                | 0.49       |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HD23 | 20                  | 0.5      | 0.04                | 0.49       |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HD11 | 20                  | 0.5      | 0.04                | 0.49       |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HD12 | 20                  | 0.5      | 0.04                | 0.49       |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HD13 | 20                  | 0.5      | 0.04                | 0.49       |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HD21 | 20                  | 0.5      | 0.04                | 0.49       |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HD22 | 20                  | 0.5      | 0.04                | 0.49       |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HD23 | 20                  | 0.5      | 0.04                | 0.49       |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HD11 | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HD12 | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HD13 | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HD11 | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HD12 | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HD13 | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.5      | 0.03                | 0.51       |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H    | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H    | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:13:LEU:HG   | 20                  | 0.5      | 0.03                | 0.51       |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HD1   | 20                  | 0.5      | 0.0                 | 0.5        |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HD2   | 20                  | 0.5      | 0.0                 | 0.5        |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:8:PHE:H     | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HA   | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:17:LYS:H    | 20                  | 0.5      | 0.03                | 0.49       |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HD2  | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HD3  | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HD2 | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HD3 | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2   | 1:A:10:ASP:H   | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3   | 1:A:10:ASP:H   | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG2 | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG3 | 20                  | 0.5      | 0.01                | 0.5        |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:6:ALA:HA   | 20                  | 0.49     | 0.04                | 0.5        |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11  | 1:A:7:PHE:HB2  | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11  | 1:A:7:PHE:HB3  | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12  | 1:A:7:PHE:HB2  | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12  | 1:A:7:PHE:HB3  | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13  | 1:A:7:PHE:HB2  | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13  | 1:A:7:PHE:HB3  | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21  | 1:A:7:PHE:HB2  | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21  | 1:A:7:PHE:HB3  | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22  | 1:A:7:PHE:HB2  | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22  | 1:A:7:PHE:HB3  | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:7:PHE:HB2  | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:7:PHE:HB3  | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:9:ARG:HA   | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HA  | 20                  | 0.49     | 0.04                | 0.48       |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HA  | 20                  | 0.49     | 0.04                | 0.48       |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HG2 | 20                  | 0.49     | 0.05                | 0.5        |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HG3 | 20                  | 0.49     | 0.05                | 0.5        |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HG2 | 20                  | 0.49     | 0.05                | 0.5        |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HG3 | 20                  | 0.49     | 0.05                | 0.5        |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2   | 1:A:11:PHE:HE1 | 20                  | 0.49     | 0.0                 | 0.49       |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2   | 1:A:11:PHE:HE2 | 20                  | 0.49     | 0.0                 | 0.49       |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3   | 1:A:11:PHE:HE1 | 20                  | 0.49     | 0.0                 | 0.49       |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3   | 1:A:11:PHE:HE2 | 20                  | 0.49     | 0.0                 | 0.49       |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H    | 1:A:16:LYS:HE2 | 20                  | 0.49     | 0.03                | 0.48       |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H    | 1:A:16:LYS:HE3 | 20                  | 0.49     | 0.03                | 0.48       |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:8:PHE:HA   | 20                  | 0.49     | 0.0                 | 0.49       |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:8:PHE:HA   | 20                  | 0.49     | 0.0                 | 0.49       |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2   | 1:A:10:ASP:H   | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3   | 1:A:10:ASP:H   | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2   | 1:A:10:ASP:H   | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3   | 1:A:10:ASP:H   | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2  | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3  | 20                  | 0.49     | 0.01                | 0.49       |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H     | 1:A:8:PHE:HA    | 20                  | 0.48     | 0.0                 | 0.48       |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:8:PHE:HZ    | 20                  | 0.48     | 0.0                 | 0.48       |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:8:PHE:HZ    | 20                  | 0.48     | 0.0                 | 0.48       |
| (1,233) | 1:A:5:SER:H     | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.48     | 0.01                | 0.48       |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HD11 | 20                  | 0.48     | 0.0                 | 0.48       |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HD12 | 20                  | 0.48     | 0.0                 | 0.48       |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HD13 | 20                  | 0.48     | 0.0                 | 0.48       |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HD11 | 20                  | 0.48     | 0.0                 | 0.48       |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HD12 | 20                  | 0.48     | 0.0                 | 0.48       |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HD13 | 20                  | 0.48     | 0.0                 | 0.48       |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:6:ALA:H     | 20                  | 0.48     | 0.01                | 0.48       |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:6:ALA:H     | 20                  | 0.48     | 0.01                | 0.48       |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H    | 1:A:17:LYS:H    | 20                  | 0.48     | 0.02                | 0.48       |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2  | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.48     | 0.04                | 0.48       |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3  | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.48     | 0.04                | 0.48       |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H     | 1:A:8:PHE:HD1   | 20                  | 0.47     | 0.0                 | 0.47       |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H     | 1:A:8:PHE:HD2   | 20                  | 0.47     | 0.0                 | 0.47       |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2  | 1:A:17:LYS:H    | 20                  | 0.47     | 0.01                | 0.47       |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3  | 1:A:17:LYS:H    | 20                  | 0.47     | 0.01                | 0.47       |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H     | 1:A:12:ILE:H    | 20                  | 0.47     | 0.01                | 0.47       |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.47     | 0.03                | 0.48       |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2   | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.47     | 0.01                | 0.47       |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3   | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.47     | 0.01                | 0.47       |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2   | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.47     | 0.01                | 0.47       |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3   | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.47     | 0.01                | 0.47       |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA    | 1:A:12:ILE:HD11 | 20                  | 0.47     | 0.01                | 0.47       |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA    | 1:A:12:ILE:HD12 | 20                  | 0.47     | 0.01                | 0.47       |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA    | 1:A:12:ILE:HD13 | 20                  | 0.47     | 0.01                | 0.47       |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:8:PHE:HZ    | 20                  | 0.47     | 0.0                 | 0.47       |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:8:PHE:HZ    | 20                  | 0.47     | 0.0                 | 0.47       |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:13:LEU:HD11 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:13:LEU:HD12 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:13:LEU:HD13 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:13:LEU:HD21 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:13:LEU:HD22 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:13:LEU:HD23 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:13:LEU:HD11 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:13:LEU:HD12 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:13:LEU:HD13 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:13:LEU:HD21 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:13:LEU:HD22 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:13:LEU:HD23 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:13:LEU:HD11 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:13:LEU:HD12 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:13:LEU:HD13 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:13:LEU:HD21 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:13:LEU:HD22 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:13:LEU:HD23 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:13:LEU:HD11 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:13:LEU:HD12 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:13:LEU:HD13 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:13:LEU:HD21 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:13:LEU:HD22 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:13:LEU:HD23 | 20                  | 0.47     | 0.07                | 0.49       |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H     | 1:A:7:PHE:HE1   | 20                  | 0.47     | 0.0                 | 0.47       |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H     | 1:A:7:PHE:HE2   | 20                  | 0.47     | 0.0                 | 0.47       |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2  | 20                  | 0.46     | 0.12                | 0.5        |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3  | 20                  | 0.46     | 0.12                | 0.5        |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2  | 20                  | 0.46     | 0.12                | 0.5        |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3  | 20                  | 0.46     | 0.12                | 0.5        |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2  | 20                  | 0.46     | 0.12                | 0.5        |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3  | 20                  | 0.46     | 0.12                | 0.5        |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2  | 20                  | 0.46     | 0.12                | 0.5        |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3  | 20                  | 0.46     | 0.12                | 0.5        |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2  | 20                  | 0.46     | 0.12                | 0.5        |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3  | 20                  | 0.46     | 0.12                | 0.5        |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2  | 20                  | 0.46     | 0.12                | 0.5        |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3  | 20                  | 0.46     | 0.12                | 0.5        |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H     | 1:A:7:PHE:HB2   | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H     | 1:A:7:PHE:HB3   | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA    | 1:A:11:PHE:HA   | 20                  | 0.46     | 0.0                 | 0.46       |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:15:ARG:HG2  | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:15:ARG:HG3  | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:15:ARG:HG2  | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:15:ARG:HG3  | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:H     | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:H     | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:H     | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:H     | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB2   | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.45       |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB3   | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.45       |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB2   | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.45       |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB3  | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.45       |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB2  | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.45       |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB3  | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.45       |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB2  | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.45       |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB3  | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.45       |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD2 | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD3 | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:8:PHE:HZ   | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA  | 20                  | 0.46     | 0.02                | 0.45       |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA  | 20                  | 0.46     | 0.02                | 0.45       |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA  | 20                  | 0.46     | 0.02                | 0.45       |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA  | 20                  | 0.46     | 0.02                | 0.45       |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA  | 20                  | 0.46     | 0.02                | 0.45       |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA  | 20                  | 0.46     | 0.02                | 0.45       |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2   | 1:A:13:LEU:H   | 20                  | 0.46     | 0.07                | 0.48       |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3   | 1:A:13:LEU:H   | 20                  | 0.46     | 0.07                | 0.48       |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2   | 1:A:7:PHE:HZ   | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3   | 1:A:7:PHE:HZ   | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:8:PHE:HB2  | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.45       |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:8:PHE:HB3  | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.45       |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:8:PHE:HB2  | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.45       |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:8:PHE:HB3  | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.45       |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG    | 1:A:7:PHE:HD1  | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG    | 1:A:7:PHE:HD2  | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:8:PHE:HD1  | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:8:PHE:HD2  | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:8:PHE:HD1  | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:8:PHE:HD2  | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H   | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H   | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H   | 20                  | 0.46     | 0.01                | 0.46       |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HE1  | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.46       |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HE2  | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.46       |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2   | 1:A:7:PHE:HB2  | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2   | 1:A:7:PHE:HB3  | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3   | 1:A:7:PHE:HB2  | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3   | 1:A:7:PHE:HB3  | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2   | 1:A:7:PHE:HB2  | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2   | 1:A:7:PHE:HB3  | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3   | 1:A:7:PHE:HB2  | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3   | 1:A:7:PHE:HB3  | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:13:LEU:H   | 20                  | 0.45     | 0.02                | 0.46       |

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB2  | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB3  | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB2  | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB3  | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:13:LEU:HD11 | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:13:LEU:HD12 | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:13:LEU:HD13 | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:13:LEU:HD21 | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:13:LEU:HD22 | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:13:LEU:HD23 | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:N    | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:7:PHE:HE1   | 20                  | 0.45     | 0.02                | 0.44       |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:7:PHE:HE2   | 20                  | 0.45     | 0.02                | 0.44       |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:7:PHE:HE1   | 20                  | 0.45     | 0.02                | 0.44       |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:7:PHE:HE2   | 20                  | 0.45     | 0.02                | 0.44       |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:8:PHE:HZ    | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2   | 1:A:8:PHE:HZ    | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA    | 1:A:11:PHE:HE1  | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA    | 1:A:11:PHE:HE2  | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1   | 1:A:11:PHE:HE1  | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1   | 1:A:11:PHE:HE2  | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2   | 1:A:11:PHE:HE1  | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2   | 1:A:11:PHE:HE2  | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H     | 1:A:8:PHE:HA    | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA    | 1:A:10:ASP:HB2  | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA    | 1:A:10:ASP:HB3  | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2  | 20                  | 0.45     | 0.02                | 0.45       |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3  | 20                  | 0.45     | 0.02                | 0.45       |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2  | 20                  | 0.45     | 0.02                | 0.45       |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3  | 20                  | 0.45     | 0.02                | 0.45       |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2  | 20                  | 0.45     | 0.02                | 0.45       |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3  | 20                  | 0.45     | 0.02                | 0.45       |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2  | 20                  | 0.45     | 0.02                | 0.45       |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3  | 20                  | 0.45     | 0.02                | 0.45       |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2  | 20                  | 0.45     | 0.02                | 0.45       |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3  | 20                  | 0.45     | 0.02                | 0.45       |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2  | 20                  | 0.45     | 0.02                | 0.45       |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3  | 20                  | 0.45     | 0.02                | 0.45       |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1   | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1   | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2   | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2   | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1  | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1  | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2  | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2  | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:6:ALA:HA    | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HE   | 20                  | 0.45     | 0.02                | 0.44       |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1   | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2   | 20                  | 0.45     | 0.0                 | 0.45       |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA    | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA    | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA    | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA    | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA    | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA    | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA    | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA    | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA    | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA    | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA    | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA    | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB   | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB   | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:H    | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:H    | 20                  | 0.45     | 0.01                | 0.45       |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:5:SER:HA    | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HD2   | 20                  | 0.44     | 0.04                | 0.42       |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HD3   | 20                  | 0.44     | 0.04                | 0.42       |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:10:ASP:HB2  | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:10:ASP:HB3  | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:10:ASP:HB2  | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:10:ASP:HB3  | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HD11 | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HD12 | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HD13 | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:8:PHE:H     | 20                  | 0.44     | 0.0                 | 0.44       |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:8:PHE:H     | 20                  | 0.44     | 0.0                 | 0.44       |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:8:PHE:H     | 20                  | 0.44     | 0.0                 | 0.44       |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:12:ILE:HD11 | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:12:ILE:HD12 | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:12:ILE:HD13 | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:7:PHE:H     | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:7:PHE:H     | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|---------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H     | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H     | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1   | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2   | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1   | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2   | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1   | 20                  | 0.44     | 0.0                 | 0.44       |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2   | 20                  | 0.44     | 0.0                 | 0.44       |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2  | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3  | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 20                  | 0.44     | 0.02                | 0.43       |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 20                  | 0.44     | 0.02                | 0.43       |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 20                  | 0.44     | 0.02                | 0.43       |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 20                  | 0.44     | 0.02                | 0.43       |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2   | 20                  | 0.44     | 0.0                 | 0.44       |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3   | 20                  | 0.44     | 0.0                 | 0.44       |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.44     | 0.0                 | 0.44       |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.44     | 0.0                 | 0.44       |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:5:SER:H     | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:5:SER:H     | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:16:LYS:HA   | 20                  | 0.44     | 0.01                | 0.44       |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2  | 20                  | 0.43     | 0.02                | 0.43       |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3  | 20                  | 0.43     | 0.02                | 0.43       |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2  | 20                  | 0.43     | 0.02                | 0.43       |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3  | 20                  | 0.43     | 0.02                | 0.43       |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD2   | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.44       |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD3   | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.44       |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2   | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.44       |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3   | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.44       |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2   | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.44       |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3   | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.44       |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1   | 1:A:9:ARG:H     | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2   | 1:A:9:ARG:H     | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3   | 1:A:9:ARG:H     | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1   | 1:A:12:ILE:HB   | 20                  | 0.43     | 0.0                 | 0.43       |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2   | 1:A:12:ILE:HB   | 20                  | 0.43     | 0.0                 | 0.43       |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:H     | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2   | 1:A:6:ALA:HB1   | 20                  | 0.43     | 0.04                | 0.42       |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2   | 1:A:6:ALA:HB2   | 20                  | 0.43     | 0.04                | 0.42       |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2   | 1:A:6:ALA:HB3   | 20                  | 0.43     | 0.04                | 0.42       |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3   | 1:A:6:ALA:HB1   | 20                  | 0.43     | 0.04                | 0.42       |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3   | 1:A:6:ALA:HB2   | 20                  | 0.43     | 0.04                | 0.42       |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3   | 1:A:6:ALA:HB3   | 20                  | 0.43     | 0.04                | 0.42       |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.43     | 0.0                 | 0.43       |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2   | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.43     | 0.0                 | 0.43       |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HB2   | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HB3   | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.43     | 0.03                | 0.42       |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.43     | 0.03                | 0.42       |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA    | 1:A:8:PHE:HZ    | 20                  | 0.43     | 0.0                 | 0.43       |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:16:LYS:HE2  | 20                  | 0.43     | 0.02                | 0.44       |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:16:LYS:HE3  | 20                  | 0.43     | 0.02                | 0.44       |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HB   | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HB   | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:17:LYS:H    | 20                  | 0.43     | 0.09                | 0.45       |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD11 | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD12 | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD13 | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD11 | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD12 | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD13 | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2   | 1:A:8:PHE:H     | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3   | 1:A:8:PHE:H     | 20                  | 0.43     | 0.01                | 0.43       |
| (2,35)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.43     | 0.04                | 0.44       |
| (2,35)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.43     | 0.04                | 0.44       |
| (2,35)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.43     | 0.04                | 0.44       |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,35)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.43     | 0.04                | 0.44       |
| (2,35)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.43     | 0.04                | 0.44       |
| (2,35)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.43     | 0.04                | 0.44       |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HB   | 20                  | 0.42     | 0.02                | 0.43       |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HB   | 20                  | 0.42     | 0.02                | 0.43       |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HB   | 20                  | 0.42     | 0.01                | 0.43       |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HB   | 20                  | 0.42     | 0.01                | 0.43       |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.42     | 0.02                | 0.42       |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.42     | 0.02                | 0.42       |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:4:LEU:HB2   | 20                  | 0.42     | 0.02                | 0.41       |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:4:LEU:HB3   | 20                  | 0.42     | 0.02                | 0.41       |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:4:LEU:HB2   | 20                  | 0.42     | 0.02                | 0.41       |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:4:LEU:HB3   | 20                  | 0.42     | 0.02                | 0.41       |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2   | 1:A:8:PHE:HZ    | 20                  | 0.42     | 0.0                 | 0.42       |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3   | 1:A:8:PHE:HZ    | 20                  | 0.42     | 0.0                 | 0.42       |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2   | 1:A:8:PHE:HZ    | 20                  | 0.42     | 0.0                 | 0.42       |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3   | 1:A:8:PHE:HZ    | 20                  | 0.42     | 0.0                 | 0.42       |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2  | 20                  | 0.42     | 0.03                | 0.41       |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3  | 20                  | 0.42     | 0.03                | 0.41       |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2  | 20                  | 0.42     | 0.03                | 0.41       |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3  | 20                  | 0.42     | 0.03                | 0.41       |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2  | 20                  | 0.42     | 0.03                | 0.41       |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3  | 20                  | 0.42     | 0.03                | 0.41       |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2  | 20                  | 0.42     | 0.03                | 0.41       |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3  | 20                  | 0.42     | 0.03                | 0.41       |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2  | 20                  | 0.42     | 0.03                | 0.41       |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3  | 20                  | 0.42     | 0.03                | 0.41       |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2  | 20                  | 0.42     | 0.03                | 0.41       |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3  | 20                  | 0.42     | 0.03                | 0.41       |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HB2  | 20                  | 0.42     | 0.01                | 0.42       |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HB3  | 20                  | 0.42     | 0.01                | 0.42       |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.42     | 0.0                 | 0.42       |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.42     | 0.0                 | 0.42       |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:HD11 | 20                  | 0.42     | 0.01                | 0.42       |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:HD12 | 20                  | 0.42     | 0.01                | 0.42       |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:HD13 | 20                  | 0.42     | 0.01                | 0.42       |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2   | 1:A:6:ALA:H     | 20                  | 0.42     | 0.02                | 0.41       |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3   | 1:A:6:ALA:H     | 20                  | 0.42     | 0.02                | 0.41       |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11  | 1:A:7:PHE:H     | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12  | 1:A:7:PHE:H     | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13  | 1:A:7:PHE:H     | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21  | 1:A:7:PHE:H     | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22  | 1:A:7:PHE:H    | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:7:PHE:H    | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11  | 1:A:7:PHE:H    | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12  | 1:A:7:PHE:H    | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13  | 1:A:7:PHE:H    | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21  | 1:A:7:PHE:H    | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22  | 1:A:7:PHE:H    | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:7:PHE:H    | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HA  | 20                  | 0.41     | 0.01                | 0.41       |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:8:PHE:H    | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HB  | 20                  | 0.41     | 0.01                | 0.41       |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2   | 1:A:10:ASP:H   | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3   | 1:A:10:ASP:H   | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H   | 20                  | 0.41     | 0.03                | 0.4        |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H   | 20                  | 0.41     | 0.03                | 0.4        |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H   | 20                  | 0.41     | 0.03                | 0.4        |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1   | 1:A:8:PHE:HB2  | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1   | 1:A:8:PHE:HB3  | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2   | 1:A:8:PHE:HB2  | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2   | 1:A:8:PHE:HB3  | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3   | 1:A:8:PHE:HB2  | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3   | 1:A:8:PHE:HB3  | 20                  | 0.41     | 0.0                 | 0.41       |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:15:ARG:HG2 | 20                  | 0.41     | 0.02                | 0.4        |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:15:ARG:HG3 | 20                  | 0.41     | 0.02                | 0.4        |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2   | 1:A:15:ARG:HG2 | 20                  | 0.41     | 0.02                | 0.4        |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2   | 1:A:15:ARG:HG3 | 20                  | 0.41     | 0.02                | 0.4        |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2   | 1:A:6:ALA:HB1  | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2   | 1:A:6:ALA:HB2  | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2   | 1:A:6:ALA:HB3  | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3   | 1:A:6:ALA:HB1  | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3   | 1:A:6:ALA:HB2  | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3   | 1:A:6:ALA:HB3  | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2   | 1:A:6:ALA:HB1  | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2   | 1:A:6:ALA:HB2  | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2   | 1:A:6:ALA:HB3  | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3   | 1:A:6:ALA:HB1  | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3   | 1:A:6:ALA:HB2  | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3   | 1:A:6:ALA:HB3  | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG    | 1:A:7:PHE:HE1  | 20                  | 0.4      | 0.02                | 0.41       |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG    | 1:A:7:PHE:HE2  | 20                  | 0.4      | 0.02                | 0.41       |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1   | 1:A:8:PHE:HD1  | 20                  | 0.4      | 0.0                 | 0.4        |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1   | 1:A:8:PHE:HD2  | 20                  | 0.4      | 0.0                 | 0.4        |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:8:PHE:HD1   | 20                  | 0.4      | 0.0                 | 0.4        |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:8:PHE:HD2   | 20                  | 0.4      | 0.0                 | 0.4        |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:8:PHE:HD1   | 20                  | 0.4      | 0.0                 | 0.4        |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:8:PHE:HD2   | 20                  | 0.4      | 0.0                 | 0.4        |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:9:ARG:HA    | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.4      | 0.0                 | 0.4        |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.4      | 0.0                 | 0.4        |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HG    | 20                  | 0.4      | 0.04                | 0.39       |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HG    | 20                  | 0.4      | 0.04                | 0.39       |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.4      | 0.0                 | 0.4        |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.4      | 0.0                 | 0.4        |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.4      | 0.0                 | 0.4        |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.4      | 0.0                 | 0.4        |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:10:ASP:H    | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 20                  | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:H    | 20                  | 0.39     | 0.02                | 0.4        |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2   | 20                  | 0.39     | 0.01                | 0.39       |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3   | 20                  | 0.39     | 0.01                | 0.39       |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2   | 20                  | 0.39     | 0.01                | 0.39       |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3   | 20                  | 0.39     | 0.01                | 0.39       |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2   | 20                  | 0.39     | 0.01                | 0.39       |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3   | 20                  | 0.39     | 0.01                | 0.39       |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2   | 20                  | 0.39     | 0.01                | 0.39       |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3   | 20                  | 0.39     | 0.01                | 0.39       |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2   | 20                  | 0.39     | 0.01                | 0.39       |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3   | 20                  | 0.39     | 0.01                | 0.39       |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2   | 20                  | 0.39     | 0.01                | 0.39       |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3   | 20                  | 0.39     | 0.01                | 0.39       |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:12:ILE:HD11 | 20                  | 0.39     | 0.01                | 0.39       |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:12:ILE:HD12 | 20                  | 0.39     | 0.01                | 0.39       |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:12:ILE:HD13 | 20                  | 0.39     | 0.01                | 0.39       |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:12:ILE:HD11 | 20                  | 0.39     | 0.01                | 0.39       |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:12:ILE:HD12 | 20                  | 0.39     | 0.01                | 0.39       |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:12:ILE:HD13 | 20                  | 0.39     | 0.01                | 0.39       |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20                  | 0.39     | 0.05                | 0.37       |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2   | 1:A:5:SER:HB2  | 20                  | 0.39     | 0.0                 | 0.39       |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2   | 1:A:5:SER:HB3  | 20                  | 0.39     | 0.0                 | 0.39       |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3   | 1:A:5:SER:HB2  | 20                  | 0.39     | 0.0                 | 0.39       |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3   | 1:A:5:SER:HB3  | 20                  | 0.39     | 0.0                 | 0.39       |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2   | 1:A:11:PHE:HE1 | 20                  | 0.39     | 0.0                 | 0.39       |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2   | 1:A:11:PHE:HE2 | 20                  | 0.39     | 0.0                 | 0.39       |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3   | 1:A:11:PHE:HE1 | 20                  | 0.39     | 0.0                 | 0.39       |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3   | 1:A:11:PHE:HE2 | 20                  | 0.39     | 0.0                 | 0.39       |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1   | 1:A:8:PHE:HZ   | 20                  | 0.39     | 0.0                 | 0.39       |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2   | 1:A:8:PHE:HZ   | 20                  | 0.39     | 0.0                 | 0.39       |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 20                  | 0.39     | 0.01                | 0.39       |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O     | 1:A:13:LEU:N   | 20                  | 0.38     | 0.01                | 0.39       |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG    | 1:A:7:PHE:H    | 20                  | 0.38     | 0.01                | 0.39       |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:11:PHE:HE1 | 20                  | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:11:PHE:HE2 | 20                  | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:11:PHE:HE1 | 20                  | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:11:PHE:HE2 | 20                  | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:11:PHE:HE1 | 20                  | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 20                  | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 20                  | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 20                  | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 20                  | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 20                  | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 20                  | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 20                  | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HA   | 20                  | 0.37     | 0.01                | 0.38       |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HA   | 20                  | 0.37     | 0.01                | 0.38       |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.37     | 0.01                | 0.37       |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.37     | 0.01                | 0.37       |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:10:ASP:HA   | 20                  | 0.37     | 0.0                 | 0.37       |
| (1,97)  | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HA    | 20                  | 0.37     | 0.01                | 0.37       |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:9:ARG:HG2   | 20                  | 0.37     | 0.02                | 0.36       |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:9:ARG:HG3   | 20                  | 0.37     | 0.02                | 0.36       |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:9:ARG:HG2   | 20                  | 0.37     | 0.02                | 0.36       |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:9:ARG:HG3   | 20                  | 0.37     | 0.02                | 0.36       |
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HA   | 20                  | 0.37     | 0.01                | 0.37       |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:HA   | 20                  | 0.37     | 0.0                 | 0.37       |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:HA   | 20                  | 0.37     | 0.0                 | 0.37       |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:HA   | 20                  | 0.37     | 0.0                 | 0.37       |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:HA   | 20                  | 0.37     | 0.0                 | 0.37       |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 20                  | 0.37     | 0.01                | 0.37       |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 20                  | 0.37     | 0.01                | 0.37       |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 20                  | 0.37     | 0.01                | 0.37       |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:10:ASP:H    | 20                  | 0.37     | 0.01                | 0.37       |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.37     | 0.01                | 0.37       |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HA    | 20                  | 0.36     | 0.0                 | 0.36       |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.36     | 0.04                | 0.35       |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.36     | 0.04                | 0.35       |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG12 | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG13 | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG12 | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG13 | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 20                  | 0.36     | 0.0                 | 0.36       |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 20                  | 0.36     | 0.0                 | 0.36       |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HG2  | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HG3  | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HG2  | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HG3  | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.36     | 0.06                | 0.34       |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.36     | 0.06                | 0.34       |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG2   | 20                  | 0.36     | 0.05                | 0.38       |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG3   | 20                  | 0.36     | 0.05                | 0.38       |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG2   | 20                  | 0.36     | 0.05                | 0.38       |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG3   | 20                  | 0.36     | 0.05                | 0.38       |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:10:ASP:H    | 20                  | 0.36     | 0.0                 | 0.36       |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HE1  | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HE2  | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.36     | 0.01                | 0.36       |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HZ    | 20                  | 0.35     | 0.0                 | 0.35       |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.35     | 0.0                 | 0.35       |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.35     | 0.0                 | 0.35       |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.35     | 0.0                 | 0.35       |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.35     | 0.0                 | 0.35       |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA   | 20                  | 0.35     | 0.02                | 0.35       |
| (2,15)  | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:12:ILE:HD11 | 20                  | 0.35     | 0.01                | 0.35       |
| (2,15)  | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:12:ILE:HD12 | 20                  | 0.35     | 0.01                | 0.35       |
| (2,15)  | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:12:ILE:HD13 | 20                  | 0.35     | 0.01                | 0.35       |
| (2,15)  | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.35     | 0.01                | 0.35       |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,15)  | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.35     | 0.01                | 0.35       |
| (2,15)  | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.35     | 0.01                | 0.35       |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:7:PHE:H     | 20                  | 0.35     | 0.0                 | 0.35       |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:7:PHE:H     | 20                  | 0.35     | 0.0                 | 0.35       |
| (2,18)  | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 20                  | 0.35     | 0.0                 | 0.35       |
| (2,18)  | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 20                  | 0.35     | 0.0                 | 0.35       |
| (2,18)  | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 20                  | 0.35     | 0.0                 | 0.35       |
| (2,18)  | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.35     | 0.0                 | 0.35       |
| (2,18)  | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.35     | 0.0                 | 0.35       |
| (2,18)  | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.35     | 0.0                 | 0.35       |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 20                  | 0.35     | 0.08                | 0.32       |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 20                  | 0.35     | 0.08                | 0.32       |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB   | 20                  | 0.35     | 0.01                | 0.35       |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB   | 20                  | 0.35     | 0.01                | 0.35       |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HA   | 20                  | 0.34     | 0.01                | 0.34       |
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HA   | 20                  | 0.34     | 0.07                | 0.32       |
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:H     | 20                  | 0.34     | 0.01                | 0.34       |
| (2,27)  | 1:A:11:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HG12 | 20                  | 0.34     | 0.05                | 0.37       |
| (2,27)  | 1:A:11:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HG13 | 20                  | 0.34     | 0.05                | 0.37       |
| (2,27)  | 1:A:11:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.34     | 0.05                | 0.37       |
| (2,27)  | 1:A:11:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.34     | 0.05                | 0.37       |
| (2,27)  | 1:A:11:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.34     | 0.05                | 0.37       |
| (2,27)  | 1:A:11:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.34     | 0.05                | 0.37       |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD11  | 20                  | 0.34     | 0.03                | 0.36       |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD12  | 20                  | 0.34     | 0.03                | 0.36       |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD13  | 20                  | 0.34     | 0.03                | 0.36       |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD21  | 20                  | 0.34     | 0.03                | 0.36       |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD22  | 20                  | 0.34     | 0.03                | 0.36       |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD23  | 20                  | 0.34     | 0.03                | 0.36       |
| (1,87)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD11  | 20                  | 0.34     | 0.03                | 0.36       |
| (1,87)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD12  | 20                  | 0.34     | 0.03                | 0.36       |
| (1,87)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD13  | 20                  | 0.34     | 0.03                | 0.36       |
| (1,87)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD21  | 20                  | 0.34     | 0.03                | 0.36       |
| (1,87)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD22  | 20                  | 0.34     | 0.03                | 0.36       |
| (1,87)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD23  | 20                  | 0.34     | 0.03                | 0.36       |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 20                  | 0.34     | 0.0                 | 0.34       |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.34     | 0.0                 | 0.34       |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.34     | 0.0                 | 0.34       |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.34     | 0.0                 | 0.34       |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.34     | 0.0                 | 0.34       |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HA   | 20                  | 0.34     | 0.04                | 0.34       |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA   | 20                  | 0.34     | 0.01                | 0.34       |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA   | 20                  | 0.34     | 0.01                | 0.34       |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA   | 20                  | 0.34     | 0.01                | 0.34       |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA   | 20                  | 0.34     | 0.01                | 0.34       |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O   | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.34     | 0.08                | 0.31       |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.33     | 0.01                | 0.33       |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.33     | 0.01                | 0.33       |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA   | 20                  | 0.33     | 0.01                | 0.33       |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA   | 20                  | 0.33     | 0.01                | 0.33       |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG12 | 20                  | 0.33     | 0.01                | 0.33       |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG13 | 20                  | 0.33     | 0.01                | 0.33       |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.33     | 0.01                | 0.33       |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.33     | 0.01                | 0.33       |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.33     | 0.01                | 0.33       |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.33     | 0.01                | 0.33       |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 20                  | 0.33     | 0.1                 | 0.3        |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 20                  | 0.33     | 0.1                 | 0.3        |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.33     | 0.01                | 0.32       |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.32     | 0.04                | 0.33       |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB   | 20                  | 0.32     | 0.02                | 0.33       |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB   | 20                  | 0.32     | 0.02                | 0.33       |
| (2,21)  | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 20                  | 0.32     | 0.01                | 0.32       |
| (2,21)  | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 20                  | 0.32     | 0.01                | 0.32       |
| (2,21)  | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 20                  | 0.32     | 0.01                | 0.32       |
| (2,21)  | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.32     | 0.01                | 0.32       |
| (2,21)  | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.32     | 0.01                | 0.32       |
| (2,21)  | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.32     | 0.01                | 0.32       |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HB2   | 20                  | 0.32     | 0.02                | 0.31       |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HB3   | 20                  | 0.32     | 0.02                | 0.31       |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HB2   | 20                  | 0.32     | 0.02                | 0.31       |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HB3   | 20                  | 0.32     | 0.02                | 0.31       |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:11:PHE:HA   | 20                  | 0.32     | 0.01                | 0.32       |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:11:PHE:HA   | 20                  | 0.32     | 0.01                | 0.32       |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:H    | 20                  | 0.32     | 0.02                | 0.32       |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.32     | 0.02                | 0.33       |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.32     | 0.02                | 0.33       |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.32     | 0.02                | 0.33       |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.32     | 0.02                | 0.33       |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.32     | 0.0                 | 0.32       |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.32     | 0.0                 | 0.32       |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H     | 20                  | 0.32     | 0.01                | 0.31       |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H     | 20                  | 0.32     | 0.01                | 0.31       |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H     | 20                  | 0.32     | 0.01                | 0.31       |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H     | 20                  | 0.32     | 0.01                | 0.31       |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H     | 20                  | 0.32     | 0.01                | 0.31       |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H     | 20                  | 0.32     | 0.01                | 0.31       |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:9:ARG:HA    | 20                  | 0.31     | 0.01                | 0.31       |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:9:ARG:HA    | 20                  | 0.31     | 0.01                | 0.31       |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:9:ARG:HA    | 20                  | 0.31     | 0.01                | 0.31       |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA    | 20                  | 0.31     | 0.02                | 0.32       |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD1  | 1:A:12:ILE:HG12 | 20                  | 0.31     | 0.03                | 0.31       |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD1  | 1:A:12:ILE:HG13 | 20                  | 0.31     | 0.03                | 0.31       |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.31     | 0.03                | 0.31       |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.31     | 0.03                | 0.31       |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD1  | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.31     | 0.03                | 0.31       |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD1  | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.31     | 0.03                | 0.31       |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD2  | 1:A:12:ILE:HG12 | 20                  | 0.31     | 0.03                | 0.31       |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD2  | 1:A:12:ILE:HG13 | 20                  | 0.31     | 0.03                | 0.31       |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.31     | 0.03                | 0.31       |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.31     | 0.03                | 0.31       |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.31     | 0.03                | 0.31       |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD2  | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.31     | 0.03                | 0.31       |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:HA    | 20                  | 0.31     | 0.01                | 0.3        |
| (1,84)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HA    | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA   | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA   | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HE1  | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HE2  | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HE1  | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HE2  | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H    | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H    | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.3      | 0.0                 | 0.3        |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ    | 20                  | 0.3      | 0.0                 | 0.3        |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG12 | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG13 | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 20                  | 0.29     | 0.01                | 0.29       |
| (1,85)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HB2   | 20                  | 0.29     | 0.01                | 0.29       |
| (1,85)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HB3   | 20                  | 0.29     | 0.01                | 0.29       |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG12 | 20                  | 0.29     | 0.07                | 0.27       |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG13 | 20                  | 0.29     | 0.07                | 0.27       |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.29     | 0.07                | 0.27       |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.29     | 0.07                | 0.27       |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.29     | 0.07                | 0.27       |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.29     | 0.07                | 0.27       |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE1  | 20                  | 0.28     | 0.0                 | 0.28       |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE2  | 20                  | 0.28     | 0.0                 | 0.28       |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H     | 1:A:5:SER:HA    | 20                  | 0.28     | 0.01                | 0.28       |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG12 | 20                  | 0.28     | 0.02                | 0.29       |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG13 | 20                  | 0.28     | 0.02                | 0.29       |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.28     | 0.02                | 0.29       |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.28     | 0.02                | 0.29       |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.28     | 0.02                | 0.29       |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.28     | 0.02                | 0.29       |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG12 | 20                  | 0.28     | 0.02                | 0.29       |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG13 | 20                  | 0.28     | 0.02                | 0.29       |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.28     | 0.02                | 0.29       |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.28     | 0.02                | 0.29       |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.28     | 0.02                | 0.29       |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.28     | 0.02                | 0.29       |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HB2   | 20                  | 0.28     | 0.02                | 0.28       |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HB3   | 20                  | 0.28     | 0.02                | 0.28       |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.28     | 0.01                | 0.28       |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.28     | 0.01                | 0.28       |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.28     | 0.01                | 0.28       |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.28     | 0.01                | 0.28       |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.28     | 0.01                | 0.28       |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.28     | 0.01                | 0.28       |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.28     | 0.04                | 0.29       |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HA   | 20                  | 0.27     | 0.01                | 0.27       |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:12:ILE:HA   | 20                  | 0.27     | 0.01                | 0.27       |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:12:ILE:HA   | 20                  | 0.27     | 0.01                | 0.27       |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H     | 1:A:8:PHE:HZ    | 20                  | 0.27     | 0.0                 | 0.27       |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:11:PHE:H    | 20                  | 0.27     | 0.0                 | 0.27       |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:7:PHE:HE1   | 20                  | 0.27     | 0.0                 | 0.27       |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:7:PHE:HE2   | 20                  | 0.27     | 0.0                 | 0.27       |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:7:PHE:HE1   | 20                  | 0.27     | 0.0                 | 0.27       |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:7:PHE:HE2   | 20                  | 0.27     | 0.0                 | 0.27       |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HD2  | 20                  | 0.27     | 0.04                | 0.26       |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HD3  | 20                  | 0.27     | 0.04                | 0.26       |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.27     | 0.02                | 0.26       |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:8:PHE:H     | 20                  | 0.26     | 0.02                | 0.26       |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HB2  | 20                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 20                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:H    | 20                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:H    | 20                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:H    | 20                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:H    | 20                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1  | 1:A:11:PHE:HA  | 20                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2  | 1:A:11:PHE:HA  | 20                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H   | 20                  | 0.26     | 0.0                 | 0.26       |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H   | 20                  | 0.26     | 0.0                 | 0.26       |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB1  | 20                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB2  | 20                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB3  | 20                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:16:LYS:H   | 20                  | 0.26     | 0.02                | 0.26       |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HA  | 20                  | 0.26     | 0.02                | 0.26       |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HZ   | 20                  | 0.26     | 0.02                | 0.26       |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:10:ASP:H   | 20                  | 0.25     | 0.01                | 0.26       |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:10:ASP:H   | 20                  | 0.25     | 0.01                | 0.26       |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD11 | 20                  | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD12 | 20                  | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD13 | 20                  | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD21 | 20                  | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD22 | 20                  | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD23 | 20                  | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD11 | 20                  | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD12 | 20                  | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD13 | 20                  | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD21 | 20                  | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD22 | 20                  | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD23 | 20                  | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:H    | 20                  | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:7:PHE:HZ   | 20                  | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H    | 20                  | 0.25     | 0.01                | 0.25       |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H    | 20                  | 0.25     | 0.01                | 0.25       |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H    | 20                  | 0.25     | 0.01                | 0.25       |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H    | 20                  | 0.25     | 0.01                | 0.25       |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H    | 20                  | 0.25     | 0.01                | 0.25       |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H    | 20                  | 0.25     | 0.01                | 0.25       |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:10:ASP:HB2 | 20                  | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:10:ASP:HB3 | 20                  | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:10:ASP:HB2 | 20                  | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:10:ASP:HB3 | 20                  | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD11 | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|---------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 20                  | 0.25     | 0.06                | 0.25       |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD11 | 20                  | 0.24     | 0.02                | 0.24       |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD12 | 20                  | 0.24     | 0.02                | 0.24       |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD13 | 20                  | 0.24     | 0.02                | 0.24       |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD21 | 20                  | 0.24     | 0.02                | 0.24       |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD22 | 20                  | 0.24     | 0.02                | 0.24       |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD23 | 20                  | 0.24     | 0.02                | 0.24       |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD11 | 20                  | 0.24     | 0.02                | 0.24       |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD12 | 20                  | 0.24     | 0.02                | 0.24       |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD13 | 20                  | 0.24     | 0.02                | 0.24       |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD21 | 20                  | 0.24     | 0.02                | 0.24       |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD22 | 20                  | 0.24     | 0.02                | 0.24       |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD23 | 20                  | 0.24     | 0.02                | 0.24       |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:12:ILE:HD11 | 20                  | 0.24     | 0.01                | 0.24       |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:12:ILE:HD12 | 20                  | 0.24     | 0.01                | 0.24       |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:12:ILE:HD13 | 20                  | 0.24     | 0.01                | 0.24       |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H    | 20                  | 0.24     | 0.02                | 0.25       |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H    | 20                  | 0.24     | 0.02                | 0.25       |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.23     | 0.01                | 0.23       |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.23     | 0.01                | 0.23       |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:H     | 20                  | 0.23     | 0.0                 | 0.23       |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:H     | 20                  | 0.23     | 0.0                 | 0.23       |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:8:PHE:H     | 20                  | 0.23     | 0.01                | 0.23       |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:8:PHE:H     | 20                  | 0.23     | 0.01                | 0.23       |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H    | 1:A:7:PHE:HB2   | 20                  | 0.23     | 0.0                 | 0.23       |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H    | 1:A:7:PHE:HB3   | 20                  | 0.23     | 0.0                 | 0.23       |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HE1  | 20                  | 0.22     | 0.01                | 0.22       |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HE2  | 20                  | 0.22     | 0.01                | 0.22       |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HE1  | 20                  | 0.22     | 0.01                | 0.22       |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HE2  | 20                  | 0.22     | 0.01                | 0.22       |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.22     | 0.02                | 0.22       |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H    | 20                  | 0.22     | 0.02                | 0.22       |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.22     | 0.01                | 0.22       |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.22     | 0.01                | 0.22       |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.22     | 0.01                | 0.22       |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.22     | 0.01                | 0.22       |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:9:ARG:HE    | 20                  | 0.21     | 0.01                | 0.21       |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HD2  | 20                  | 0.21     | 0.01                | 0.21       |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HD3  | 20                  | 0.21     | 0.01                | 0.21       |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HD2  | 20                  | 0.21     | 0.01                | 0.21       |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HD3  | 20                  | 0.21     | 0.01                | 0.21       |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 20                  | 0.21     | 0.0                 | 0.21       |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 20                  | 0.21     | 0.0                 | 0.21       |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.21     | 0.04                | 0.19       |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.21     | 0.04                | 0.19       |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.21     | 0.04                | 0.19       |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 20                  | 0.21     | 0.04                | 0.19       |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 20                  | 0.21     | 0.02                | 0.21       |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 20                  | 0.21     | 0.02                | 0.21       |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.21     | 0.02                | 0.21       |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.21     | 0.02                | 0.21       |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.21     | 0.02                | 0.21       |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.21     | 0.02                | 0.21       |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 20                  | 0.21     | 0.02                | 0.21       |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 20                  | 0.21     | 0.02                | 0.21       |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.21     | 0.02                | 0.21       |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20                  | 0.21     | 0.02                | 0.21       |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 20                  | 0.21     | 0.02                | 0.21       |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 20                  | 0.21     | 0.02                | 0.21       |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.2      | 0.0                 | 0.2        |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.2      | 0.0                 | 0.2        |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA   | 20                  | 0.2      | 0.01                | 0.2        |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA   | 20                  | 0.2      | 0.01                | 0.2        |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.2      | 0.0                 | 0.2        |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.2      | 0.0                 | 0.2        |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H   | 1:A:14:GLN:HG2  | 20                  | 0.2      | 0.02                | 0.19       |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H   | 1:A:14:GLN:HG3  | 20                  | 0.2      | 0.02                | 0.19       |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.19     | 0.01                | 0.19       |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD11 | 20                  | 0.19     | 0.07                | 0.17       |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD12 | 20                  | 0.19     | 0.07                | 0.17       |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD13 | 20                  | 0.19     | 0.07                | 0.17       |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD21 | 20                  | 0.19     | 0.07                | 0.17       |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD22 | 20                  | 0.19     | 0.07                | 0.17       |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD23 | 20                  | 0.19     | 0.07                | 0.17       |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD1   | 20                  | 0.19     | 0.02                | 0.2        |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD2   | 20                  | 0.19     | 0.02                | 0.2        |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HA    | 20                  | 0.19     | 0.0                 | 0.19       |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB2   | 20                  | 0.19     | 0.0                 | 0.19       |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB3   | 20                  | 0.19     | 0.0                 | 0.19       |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB2   | 20                  | 0.19     | 0.0                 | 0.19       |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB3   | 20                  | 0.19     | 0.0                 | 0.19       |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB2   | 20                  | 0.19     | 0.0                 | 0.19       |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB3   | 20                  | 0.19     | 0.0                 | 0.19       |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB2   | 20                  | 0.19     | 0.0                 | 0.19       |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB3   | 20                  | 0.19     | 0.0                 | 0.19       |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 20                  | 0.18     | 0.0                 | 0.18       |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 20                  | 0.18     | 0.0                 | 0.18       |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 20                  | 0.18     | 0.0                 | 0.18       |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 20                  | 0.18     | 0.0                 | 0.18       |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:11:PHE:H    | 20                  | 0.18     | 0.01                | 0.18       |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB2  | 20                  | 0.18     | 0.14                | 0.13       |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB3  | 20                  | 0.18     | 0.14                | 0.13       |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB2  | 20                  | 0.18     | 0.14                | 0.13       |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB3  | 20                  | 0.18     | 0.14                | 0.13       |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.16     | 0.02                | 0.16       |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.16     | 0.02                | 0.16       |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HB2  | 20                  | 0.16     | 0.02                | 0.16       |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HB3  | 20                  | 0.16     | 0.02                | 0.16       |
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HG   | 20                  | 0.16     | 0.07                | 0.13       |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.16     | 0.01                | 0.16       |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.16     | 0.01                | 0.16       |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:9:ARG:HG2   | 20                  | 0.15     | 0.01                | 0.15       |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:9:ARG:HG3   | 20                  | 0.15     | 0.01                | 0.15       |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:8:PHE:HZ    | 20                  | 0.15     | 0.01                | 0.15       |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.15     | 0.0                 | 0.15       |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.15     | 0.0                 | 0.15       |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:8:PHE:HB2   | 20                  | 0.15     | 0.0                 | 0.15       |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:8:PHE:HB3   | 20                  | 0.15     | 0.0                 | 0.15       |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:17:LYS:H    | 20                  | 0.15     | 0.02                | 0.14       |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:17:LYS:H    | 20                  | 0.15     | 0.02                | 0.14       |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H     | 20                  | 0.15     | 0.01                | 0.15       |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H    | 20                  | 0.15     | 0.01                | 0.15       |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H    | 20                  | 0.15     | 0.01                | 0.15       |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H    | 20                  | 0.15     | 0.01                | 0.15       |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H    | 20                  | 0.15     | 0.01                | 0.15       |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H    | 20                  | 0.15     | 0.01                | 0.15       |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2 | 20                  | 0.15     | 0.08                | 0.12       |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3 | 20                  | 0.15     | 0.08                | 0.12       |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:5:SER:H    | 20                  | 0.14     | 0.01                | 0.14       |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:10:ASP:HB2 | 20                  | 0.14     | 0.0                 | 0.14       |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:10:ASP:HB3 | 20                  | 0.14     | 0.0                 | 0.14       |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:H   | 20                  | 0.14     | 0.01                | 0.14       |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H    | 1:A:8:PHE:HB2  | 20                  | 0.14     | 0.0                 | 0.14       |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H    | 1:A:8:PHE:HB3  | 20                  | 0.14     | 0.0                 | 0.14       |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:9:ARG:HD2  | 20                  | 0.14     | 0.01                | 0.14       |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:9:ARG:HD3  | 20                  | 0.14     | 0.01                | 0.14       |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:9:ARG:HD2  | 20                  | 0.14     | 0.01                | 0.14       |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:9:ARG:HD3  | 20                  | 0.14     | 0.01                | 0.14       |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:9:ARG:HD2  | 20                  | 0.14     | 0.01                | 0.14       |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:9:ARG:HD3  | 20                  | 0.14     | 0.01                | 0.14       |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:8:PHE:H    | 20                  | 0.13     | 0.0                 | 0.13       |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:8:PHE:H    | 20                  | 0.13     | 0.0                 | 0.13       |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:H    | 20                  | 0.13     | 0.0                 | 0.13       |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:11:PHE:HA  | 20                  | 0.11     | 0.01                | 0.11       |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:6:ALA:HA   | 19                  | 0.52     | 0.03                | 0.51       |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:6:ALA:HA   | 19                  | 0.52     | 0.03                | 0.51       |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2  | 1:A:4:LEU:HD11 | 19                  | 0.49     | 0.04                | 0.47       |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2  | 1:A:4:LEU:HD12 | 19                  | 0.49     | 0.04                | 0.47       |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2  | 1:A:4:LEU:HD13 | 19                  | 0.49     | 0.04                | 0.47       |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2  | 1:A:4:LEU:HD21 | 19                  | 0.49     | 0.04                | 0.47       |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2  | 1:A:4:LEU:HD22 | 19                  | 0.49     | 0.04                | 0.47       |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2  | 1:A:4:LEU:HD23 | 19                  | 0.49     | 0.04                | 0.47       |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3  | 1:A:4:LEU:HD11 | 19                  | 0.49     | 0.04                | 0.47       |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3  | 1:A:4:LEU:HD12 | 19                  | 0.49     | 0.04                | 0.47       |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3  | 1:A:4:LEU:HD13 | 19                  | 0.49     | 0.04                | 0.47       |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3  | 1:A:4:LEU:HD21 | 19                  | 0.49     | 0.04                | 0.47       |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3  | 1:A:4:LEU:HD22 | 19                  | 0.49     | 0.04                | 0.47       |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3  | 1:A:4:LEU:HD23 | 19                  | 0.49     | 0.04                | 0.47       |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:3:ARG:HA   | 19                  | 0.44     | 0.03                | 0.42       |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:3:ARG:HA   | 19                  | 0.44     | 0.03                | 0.42       |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2 | 1:A:17:LYS:HA  | 19                  | 0.41     | 0.06                | 0.43       |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3 | 1:A:17:LYS:HA  | 19                  | 0.41     | 0.06                | 0.43       |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2  | 1:A:4:LEU:HD11 | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:HD12  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:HD13  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:HD21  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:HD22  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:HD23  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:HD11  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:HD12  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:HD13  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:HD21  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:HD22  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:HD23  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:HD11  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:HD12  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:HD13  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:HD21  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:HD22  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:HD23  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:HD11  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:HD12  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:HD13  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:HD21  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:HD22  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:HD23  | 19                  | 0.39     | 0.04                | 0.37       |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:14:GLN:HE21 | 19                  | 0.32     | 0.03                | 0.32       |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:14:GLN:HE22 | 19                  | 0.32     | 0.03                | 0.32       |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:14:GLN:HB2  | 19                  | 0.29     | 0.04                | 0.31       |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:14:GLN:HB3  | 19                  | 0.29     | 0.04                | 0.31       |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2  | 19                  | 0.29     | 0.02                | 0.29       |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3  | 19                  | 0.29     | 0.02                | 0.29       |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2  | 19                  | 0.29     | 0.02                | 0.29       |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3  | 19                  | 0.29     | 0.02                | 0.29       |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2  | 19                  | 0.29     | 0.02                | 0.29       |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3  | 19                  | 0.29     | 0.02                | 0.29       |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2  | 19                  | 0.29     | 0.02                | 0.29       |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3  | 19                  | 0.29     | 0.02                | 0.29       |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2  | 19                  | 0.29     | 0.02                | 0.29       |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3  | 19                  | 0.29     | 0.02                | 0.29       |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2  | 19                  | 0.29     | 0.02                | 0.29       |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3  | 19                  | 0.29     | 0.02                | 0.29       |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA   | 19                  | 0.27     | 0.21                | 0.2        |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA   | 19                  | 0.27     | 0.21                | 0.2        |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:6:ALA:HB1   | 19                  | 0.19     | 0.04                | 0.16       |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:6:ALA:HB2   | 19                  | 0.19     | 0.04                | 0.16       |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:6:ALA:HB3   | 19                  | 0.19     | 0.04                | 0.16       |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:9:ARG:HE    | 19                  | 0.12     | 0.02                | 0.12       |
| (1,638) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:14:GLN:HA   | 18                  | 0.76     | 0.02                | 0.76       |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HA   | 18                  | 0.67     | 0.01                | 0.67       |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HA   | 18                  | 0.67     | 0.01                | 0.67       |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HA   | 18                  | 0.67     | 0.01                | 0.67       |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HA   | 18                  | 0.67     | 0.01                | 0.67       |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HA   | 18                  | 0.67     | 0.01                | 0.67       |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HA   | 18                  | 0.67     | 0.01                | 0.67       |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD11 | 18                  | 0.66     | 0.01                | 0.66       |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD12 | 18                  | 0.66     | 0.01                | 0.66       |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD13 | 18                  | 0.66     | 0.01                | 0.66       |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD21 | 18                  | 0.66     | 0.01                | 0.66       |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD22 | 18                  | 0.66     | 0.01                | 0.66       |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD23 | 18                  | 0.66     | 0.01                | 0.66       |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD11 | 18                  | 0.56     | 0.0                 | 0.56       |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD12 | 18                  | 0.56     | 0.0                 | 0.56       |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD13 | 18                  | 0.56     | 0.0                 | 0.56       |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD21 | 18                  | 0.56     | 0.0                 | 0.56       |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD22 | 18                  | 0.56     | 0.0                 | 0.56       |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD23 | 18                  | 0.56     | 0.0                 | 0.56       |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD11 | 18                  | 0.41     | 0.01                | 0.41       |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD12 | 18                  | 0.41     | 0.01                | 0.41       |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD13 | 18                  | 0.41     | 0.01                | 0.41       |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD21 | 18                  | 0.41     | 0.01                | 0.41       |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD22 | 18                  | 0.41     | 0.01                | 0.41       |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD23 | 18                  | 0.41     | 0.01                | 0.41       |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD11 | 18                  | 0.41     | 0.01                | 0.41       |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD12 | 18                  | 0.41     | 0.01                | 0.41       |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD13 | 18                  | 0.41     | 0.01                | 0.41       |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD21 | 18                  | 0.41     | 0.01                | 0.41       |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD22 | 18                  | 0.41     | 0.01                | 0.41       |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD23 | 18                  | 0.41     | 0.01                | 0.41       |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:13:LEU:HD11 | 18                  | 0.37     | 0.0                 | 0.37       |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:13:LEU:HD12 | 18                  | 0.37     | 0.0                 | 0.37       |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:13:LEU:HD13 | 18                  | 0.37     | 0.0                 | 0.37       |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:13:LEU:HD21 | 18                  | 0.37     | 0.0                 | 0.37       |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:13:LEU:HD22 | 18                  | 0.37     | 0.0                 | 0.37       |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:13:LEU:HD23 | 18                  | 0.37     | 0.0                 | 0.37       |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2   | 1:A:13:LEU:HD11 | 18                  | 0.37     | 0.0                 | 0.37       |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2   | 1:A:13:LEU:HD12 | 18                  | 0.37     | 0.0                 | 0.37       |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2   | 1:A:13:LEU:HD13 | 18                  | 0.37     | 0.0                 | 0.37       |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2   | 1:A:13:LEU:HD21 | 18                  | 0.37     | 0.0                 | 0.37       |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2   | 1:A:13:LEU:HD22 | 18                  | 0.37     | 0.0                 | 0.37       |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2   | 1:A:13:LEU:HD23 | 18                  | 0.37     | 0.0                 | 0.37       |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:13:LEU:HB2  | 18                  | 0.28     | 0.01                | 0.28       |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:13:LEU:HB3  | 18                  | 0.28     | 0.01                | 0.28       |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H    | 18                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H    | 18                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H    | 18                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H    | 18                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H    | 18                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H    | 18                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H    | 18                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H    | 18                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H    | 18                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H    | 18                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H    | 18                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H    | 18                  | 0.26     | 0.01                | 0.26       |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:14:GLN:HE21 | 18                  | 0.22     | 0.14                | 0.19       |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:14:GLN:HE22 | 18                  | 0.22     | 0.14                | 0.19       |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD11 | 18                  | 0.21     | 0.01                | 0.21       |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD12 | 18                  | 0.21     | 0.01                | 0.21       |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD13 | 18                  | 0.21     | 0.01                | 0.21       |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD21 | 18                  | 0.21     | 0.01                | 0.21       |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD22 | 18                  | 0.21     | 0.01                | 0.21       |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD23 | 18                  | 0.21     | 0.01                | 0.21       |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD11 | 18                  | 0.21     | 0.01                | 0.21       |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD12 | 18                  | 0.21     | 0.01                | 0.21       |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD13 | 18                  | 0.21     | 0.01                | 0.21       |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD21 | 18                  | 0.21     | 0.01                | 0.21       |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD22 | 18                  | 0.21     | 0.01                | 0.21       |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD23 | 18                  | 0.21     | 0.01                | 0.21       |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2  | 18                  | 0.18     | 0.01                | 0.18       |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3  | 18                  | 0.18     | 0.01                | 0.18       |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2  | 18                  | 0.18     | 0.01                | 0.18       |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3  | 18                  | 0.18     | 0.01                | 0.18       |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2  | 18                  | 0.18     | 0.01                | 0.18       |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3  | 18                  | 0.18     | 0.01                | 0.18       |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB2  | 18                  | 0.18     | 0.01                | 0.18       |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB3  | 18                  | 0.18     | 0.01                | 0.18       |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB2  | 18                  | 0.18     | 0.01                | 0.18       |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB3  | 18                  | 0.18     | 0.01                | 0.18       |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB2  | 18                  | 0.18     | 0.01                | 0.18       |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB3  | 18                  | 0.18     | 0.01                | 0.18       |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD2  | 1:A:15:ARG:H    | 18                  | 0.15     | 0.0                 | 0.15       |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD3  | 1:A:15:ARG:H    | 18                  | 0.15     | 0.0                 | 0.15       |
| (1,494) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:HA   | 18                  | 0.12     | 0.0                 | 0.12       |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD11 | 18                  | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD12 | 18                  | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD13 | 18                  | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD21 | 18                  | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD22 | 18                  | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD23 | 18                  | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD11 | 18                  | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD12 | 18                  | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD13 | 18                  | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD21 | 18                  | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD22 | 18                  | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD23 | 18                  | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG2   | 1:A:3:ARG:H     | 17                  | 0.14     | 0.02                | 0.14       |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG3   | 1:A:3:ARG:H     | 17                  | 0.14     | 0.02                | 0.14       |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG2   | 1:A:3:ARG:H     | 17                  | 0.14     | 0.02                | 0.14       |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG3   | 1:A:3:ARG:H     | 17                  | 0.14     | 0.02                | 0.14       |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2  | 17                  | 0.12     | 0.01                | 0.11       |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3  | 17                  | 0.12     | 0.01                | 0.11       |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2  | 17                  | 0.12     | 0.01                | 0.11       |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3  | 17                  | 0.12     | 0.01                | 0.11       |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2  | 17                  | 0.12     | 0.01                | 0.11       |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3  | 17                  | 0.12     | 0.01                | 0.11       |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG2  | 17                  | 0.12     | 0.01                | 0.11       |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG3  | 17                  | 0.12     | 0.01                | 0.11       |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG2  | 17                  | 0.12     | 0.01                | 0.11       |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG3  | 17                  | 0.12     | 0.01                | 0.11       |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG2  | 17                  | 0.12     | 0.01                | 0.11       |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG3  | 17                  | 0.12     | 0.01                | 0.11       |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:4:LEU:HD11  | 16                  | 0.16     | 0.06                | 0.15       |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:4:LEU:HD12  | 16                  | 0.16     | 0.06                | 0.15       |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:4:LEU:HD13  | 16                  | 0.16     | 0.06                | 0.15       |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:4:LEU:HD21  | 16                  | 0.16     | 0.06                | 0.15       |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:4:LEU:HD22  | 16                  | 0.16     | 0.06                | 0.15       |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:4:LEU:HD23  | 16                  | 0.16     | 0.06                | 0.15       |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:4:LEU:HD11  | 16                  | 0.16     | 0.06                | 0.15       |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:4:LEU:HD12  | 16                  | 0.16     | 0.06                | 0.15       |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:4:LEU:HD13  | 16                  | 0.16     | 0.06                | 0.15       |

*Continued on next page...*



Continued from previous page...

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:4:LEU:HD21  | 16                  | 0.16     | 0.06                | 0.15       |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:4:LEU:HD22  | 16                  | 0.16     | 0.06                | 0.15       |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:4:LEU:HD23  | 16                  | 0.16     | 0.06                | 0.15       |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG12 | 14                  | 0.24     | 0.04                | 0.26       |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG13 | 14                  | 0.24     | 0.04                | 0.26       |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 14                  | 0.24     | 0.04                | 0.26       |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 14                  | 0.24     | 0.04                | 0.26       |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG22 | 14                  | 0.24     | 0.04                | 0.26       |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG23 | 14                  | 0.24     | 0.04                | 0.26       |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:3:ARG:HE    | 13                  | 0.56     | 0.0                 | 0.56       |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:3:ARG:HE    | 13                  | 0.56     | 0.0                 | 0.56       |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD2   | 1:A:4:LEU:H     | 11                  | 0.13     | 0.01                | 0.13       |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD3   | 1:A:4:LEU:H     | 11                  | 0.13     | 0.01                | 0.13       |
| (1,438) | 1:A:9:ARG:HE    | 1:A:10:ASP:HA   | 11                  | 0.12     | 0.0                 | 0.12       |
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HG2  | 9                   | 0.15     | 0.03                | 0.14       |
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HG3  | 9                   | 0.15     | 0.03                | 0.14       |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD11  | 1:A:8:PHE:HZ    | 4                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD12  | 1:A:8:PHE:HZ    | 4                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD13  | 1:A:8:PHE:HZ    | 4                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD21  | 1:A:8:PHE:HZ    | 4                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD22  | 1:A:8:PHE:HZ    | 4                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:8:PHE:HZ    | 4                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,676) | 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:17:LYS:HG2  | 3                   | 0.46     | 0.46                | 0.13       |
| (1,676) | 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:17:LYS:HG3  | 3                   | 0.46     | 0.46                | 0.13       |
| (1,596) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:14:GLN:HE21 | 3                   | 0.22     | 0.03                | 0.21       |
| (1,596) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:14:GLN:HE22 | 3                   | 0.22     | 0.03                | 0.21       |
| (1,668) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:14:GLN:H    | 3                   | 0.2      | 0.04                | 0.17       |
| (1,668) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:14:GLN:H    | 3                   | 0.2      | 0.04                | 0.17       |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD11  | 1:A:8:PHE:HB2   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD11  | 1:A:8:PHE:HB3   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD12  | 1:A:8:PHE:HB2   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD12  | 1:A:8:PHE:HB3   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD13  | 1:A:8:PHE:HB2   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD13  | 1:A:8:PHE:HB3   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD21  | 1:A:8:PHE:HB2   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD21  | 1:A:8:PHE:HB3   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD22  | 1:A:8:PHE:HB2   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD22  | 1:A:8:PHE:HB3   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:8:PHE:HB2   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:8:PHE:HB3   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD11  | 1:A:8:PHE:HB2   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD11  | 1:A:8:PHE:HB3   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD12  | 1:A:8:PHE:HB2   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD12  | 1:A:8:PHE:HB3   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD13  | 1:A:8:PHE:HB2   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD13  | 1:A:8:PHE:HB3   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD21  | 1:A:8:PHE:HB2   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD21  | 1:A:8:PHE:HB3   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD22  | 1:A:8:PHE:HB2   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD22  | 1:A:8:PHE:HB3   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:8:PHE:HB2   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:8:PHE:HB3   | 3                   | 0.11     | 0.0                 | 0.11       |
| (1,587) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HD11 | 2                   | 0.76     | 0.0                 | 0.76       |
| (1,587) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HD12 | 2                   | 0.76     | 0.0                 | 0.76       |
| (1,587) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HD13 | 2                   | 0.76     | 0.0                 | 0.76       |
| (1,587) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HD21 | 2                   | 0.76     | 0.0                 | 0.76       |
| (1,587) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HD22 | 2                   | 0.76     | 0.0                 | 0.76       |
| (1,587) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HD23 | 2                   | 0.76     | 0.0                 | 0.76       |
| (1,588) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HD11 | 2                   | 0.76     | 0.0                 | 0.76       |
| (1,588) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HD12 | 2                   | 0.76     | 0.0                 | 0.76       |
| (1,588) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HD13 | 2                   | 0.76     | 0.0                 | 0.76       |
| (1,588) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HD21 | 2                   | 0.76     | 0.0                 | 0.76       |
| (1,588) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HD22 | 2                   | 0.76     | 0.0                 | 0.76       |
| (1,588) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HD23 | 2                   | 0.76     | 0.0                 | 0.76       |
| (1,504) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:13:LEU:HB2  | 2                   | 0.53     | 0.0                 | 0.53       |
| (1,504) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:13:LEU:HB3  | 2                   | 0.53     | 0.0                 | 0.53       |
| (2,32)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HG   | 2                   | 0.43     | 0.0                 | 0.43       |
| (2,32)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HG   | 2                   | 0.43     | 0.0                 | 0.43       |
| (2,32)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HG   | 2                   | 0.43     | 0.0                 | 0.43       |
| (2,32)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HG   | 2                   | 0.43     | 0.0                 | 0.43       |
| (2,32)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HG   | 2                   | 0.43     | 0.0                 | 0.43       |
| (2,32)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HG   | 2                   | 0.43     | 0.0                 | 0.43       |
| (1,630) | 1:A:13:LEU:HB2  | 1:A:14:GLN:HG2  | 2                   | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,630) | 1:A:13:LEU:HB2  | 1:A:14:GLN:HG3  | 2                   | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,630) | 1:A:13:LEU:HB3  | 1:A:14:GLN:HG2  | 2                   | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,630) | 1:A:13:LEU:HB3  | 1:A:14:GLN:HG3  | 2                   | 0.4      | 0.01                | 0.4        |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:13:LEU:HD11 | 2                   | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:13:LEU:HD12 | 2                   | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:13:LEU:HD13 | 2                   | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:13:LEU:HD21 | 2                   | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:13:LEU:HD22 | 2                   | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:13:LEU:HD23 | 2                   | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:13:LEU:HD11 | 2                   | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:13:LEU:HD12 | 2                   | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:13:LEU:HD13 | 2                   | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:13:LEU:HD21 | 2                   | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:13:LEU:HD22 | 2                   | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:13:LEU:HD23 | 2                   | 0.38     | 0.0                 | 0.38       |
| (1,505) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:13:LEU:HB2  | 2                   | 0.33     | 0.0                 | 0.33       |
| (1,505) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:13:LEU:HB3  | 2                   | 0.33     | 0.0                 | 0.33       |
| (1,629) | 1:A:13:LEU:HB2  | 1:A:14:GLN:H    | 2                   | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (1,629) | 1:A:13:LEU:HB3  | 1:A:14:GLN:H    | 2                   | 0.3      | 0.01                | 0.3        |
| (1,615) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:13:LEU:HG   | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HE21 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HE22 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HE21 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HE22 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HE21 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HE22 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HE21 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HE22 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HE21 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HE22 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HE21 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HE22 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HE21 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HE22 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HE21 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HE22 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HE21 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HE22 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HE21 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HE22 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HE21 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HE22 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HE21 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HE22 | 2                   | 0.25     | 0.0                 | 0.25       |
| (1,614) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:13:LEU:HD11 | 2                   | 0.24     | 0.0                 | 0.24       |
| (1,614) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:13:LEU:HD12 | 2                   | 0.24     | 0.0                 | 0.24       |
| (1,614) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:13:LEU:HD13 | 2                   | 0.24     | 0.0                 | 0.24       |
| (1,614) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:13:LEU:HD21 | 2                   | 0.24     | 0.0                 | 0.24       |
| (1,614) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:13:LEU:HD22 | 2                   | 0.24     | 0.0                 | 0.24       |
| (1,614) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:13:LEU:HD23 | 2                   | 0.24     | 0.0                 | 0.24       |
| (1,593) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HB2  | 2                   | 0.22     | 0.0                 | 0.22       |
| (1,593) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HB3  | 2                   | 0.22     | 0.0                 | 0.22       |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2  | 2                   | 0.21     | 0.0                 | 0.21       |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

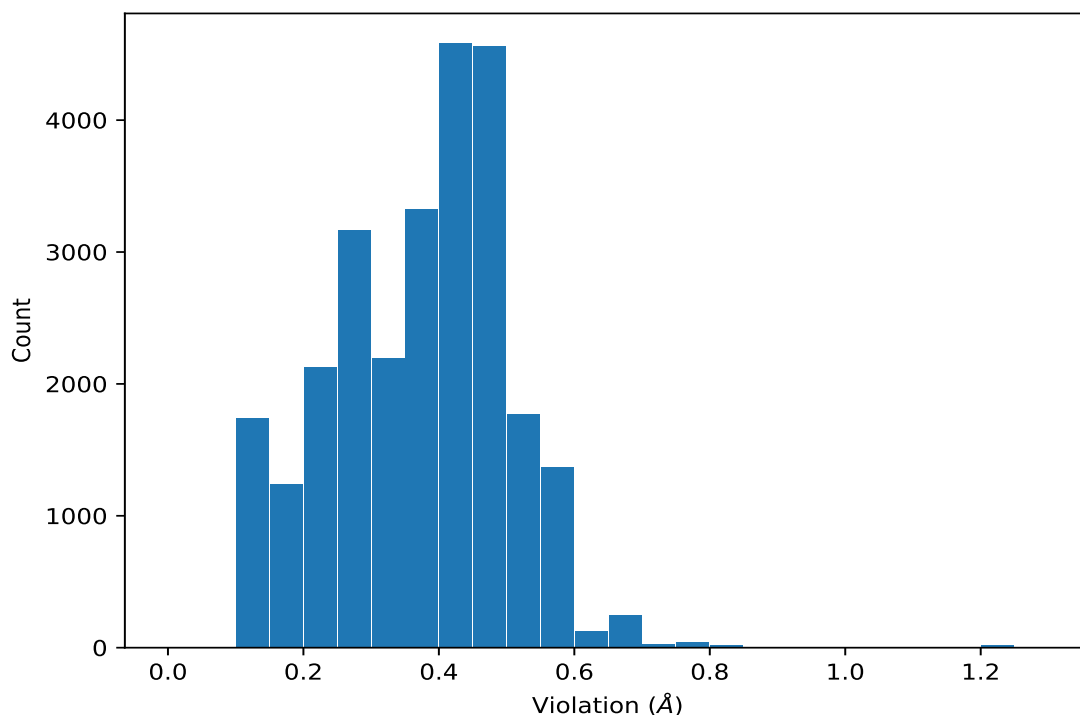
| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3  | 2                   | 0.21     | 0.0                 | 0.21       |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2  | 2                   | 0.21     | 0.0                 | 0.21       |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3  | 2                   | 0.21     | 0.0                 | 0.21       |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2  | 2                   | 0.21     | 0.0                 | 0.21       |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3  | 2                   | 0.21     | 0.0                 | 0.21       |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:HE2  | 2                   | 0.21     | 0.0                 | 0.21       |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:HE3  | 2                   | 0.21     | 0.0                 | 0.21       |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:HE2  | 2                   | 0.21     | 0.0                 | 0.21       |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:HE3  | 2                   | 0.21     | 0.0                 | 0.21       |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:HE2  | 2                   | 0.21     | 0.0                 | 0.21       |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:HE3  | 2                   | 0.21     | 0.0                 | 0.21       |
| (3,10)  | 1:A:10:ASP:O    | 1:A:14:GLN:N    | 2                   | 0.18     | 0.0                 | 0.18       |
| (1,330) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:11:PHE:HB2  | 2                   | 0.13     | 0.0                 | 0.13       |
| (1,330) | 1:A:7:PHE:HE1   | 1:A:11:PHE:HB3  | 2                   | 0.13     | 0.0                 | 0.13       |
| (1,330) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:11:PHE:HB2  | 2                   | 0.13     | 0.0                 | 0.13       |
| (1,330) | 1:A:7:PHE:HE2   | 1:A:11:PHE:HB3  | 2                   | 0.13     | 0.0                 | 0.13       |
| (1,265) | 1:A:6:ALA:HB1   | 1:A:9:ARG:HE    | 2                   | 0.12     | 0.0                 | 0.12       |
| (1,265) | 1:A:6:ALA:HB2   | 1:A:9:ARG:HE    | 2                   | 0.12     | 0.0                 | 0.12       |
| (1,265) | 1:A:6:ALA:HB3   | 1:A:9:ARG:HE    | 2                   | 0.12     | 0.0                 | 0.12       |
| (1,385) | 1:A:8:PHE:HA    | 1:A:9:ARG:H     | 2                   | 0.12     | 0.0                 | 0.12       |
| (1,459) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:13:LEU:HD11 | 2                   | 0.12     | 0.0                 | 0.12       |
| (1,459) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:13:LEU:HD12 | 2                   | 0.12     | 0.0                 | 0.12       |
| (1,459) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:13:LEU:HD13 | 2                   | 0.12     | 0.0                 | 0.12       |
| (1,459) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:13:LEU:HD21 | 2                   | 0.12     | 0.0                 | 0.12       |
| (1,459) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:13:LEU:HD22 | 2                   | 0.12     | 0.0                 | 0.12       |
| (1,459) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:13:LEU:HD23 | 2                   | 0.12     | 0.0                 | 0.12       |
| (1,485) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:11:PHE:HA   | 2                   | 0.12     | 0.0                 | 0.12       |
| (1,485) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:11:PHE:HA   | 2                   | 0.12     | 0.0                 | 0.12       |

<sup>1</sup>Number of violated models, <sup>2</sup>Standard 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) |
|--------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,18) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:3:ARG:HA | 9        | 1.28          |
| (1,18) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:3:ARG:HA | 9        | 1.28          |
| (1,16) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:3:ARG:HA | 9        | 1.28          |
| (1,16) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:3:ARG:HA | 9        | 1.28          |
| (3,1)  | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:H | 1        | 1.24          |
| (3,1)  | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:H | 2        | 1.24          |
| (3,1)  | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:H | 3        | 1.24          |
| (3,1)  | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:H | 5        | 1.24          |
| (3,1)  | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:H | 7        | 1.24          |
| (3,1)  | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:H | 11       | 1.24          |
| (3,1)  | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:H | 12       | 1.24          |
| (3,1)  | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:H | 20       | 1.24          |
| (3,1)  | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:H | 6        | 1.23          |
| (3,1)  | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:H | 9        | 1.23          |
| (3,1)  | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:H | 10       | 1.23          |
| (3,1)  | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:H | 13       | 1.23          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (3,1)   | 1:A:6:ALA:O     | 1:A:10:ASP:H    | 14       | 1.23          |
| (3,1)   | 1:A:6:ALA:O     | 1:A:10:ASP:H    | 16       | 1.23          |
| (3,1)   | 1:A:6:ALA:O     | 1:A:10:ASP:H    | 17       | 1.23          |
| (3,1)   | 1:A:6:ALA:O     | 1:A:10:ASP:H    | 18       | 1.23          |
| (3,1)   | 1:A:6:ALA:O     | 1:A:10:ASP:H    | 19       | 1.23          |
| (3,1)   | 1:A:6:ALA:O     | 1:A:10:ASP:H    | 15       | 1.22          |
| (3,1)   | 1:A:6:ALA:O     | 1:A:10:ASP:H    | 4        | 1.21          |
| (3,1)   | 1:A:6:ALA:O     | 1:A:10:ASP:H    | 8        | 1.21          |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA   | 15       | 1.15          |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA   | 15       | 1.15          |
| (1,676) | 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:17:LYS:HG2  | 11       | 1.11          |
| (1,676) | 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:17:LYS:HG3  | 11       | 1.11          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG2  | 15       | 0.96          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG3  | 15       | 0.96          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 4        | 0.86          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 8        | 0.86          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 15       | 0.86          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 2        | 0.84          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 5        | 0.84          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 9        | 0.84          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 10       | 0.84          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 11       | 0.84          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 13       | 0.84          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 14       | 0.84          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 17       | 0.84          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 19       | 0.84          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 1        | 0.83          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 3        | 0.83          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 6        | 0.83          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 7        | 0.83          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 12       | 0.83          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 16       | 0.83          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 18       | 0.83          |
| (3,5)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:H    | 20       | 0.83          |
| (1,638) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:14:GLN:HA   | 11       | 0.8           |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:14:GLN:HE21 | 15       | 0.79          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:14:GLN:HE22 | 15       | 0.79          |
| (1,638) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:14:GLN:HA   | 1        | 0.76          |
| (1,638) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:14:GLN:HA   | 2        | 0.76          |
| (1,638) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:14:GLN:HA   | 3        | 0.76          |
| (1,638) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:14:GLN:HA   | 5        | 0.76          |
| (1,638) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:14:GLN:HA   | 6        | 0.76          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,638) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:HA   | 7        | 0.76          |
| (1,638) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:HA   | 9        | 0.76          |
| (1,638) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:HA   | 10       | 0.76          |
| (1,638) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:HA   | 12       | 0.76          |
| (1,638) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:HA   | 13       | 0.76          |
| (1,638) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:HA   | 14       | 0.76          |
| (1,638) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:HA   | 16       | 0.76          |
| (1,638) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:HA   | 17       | 0.76          |
| (1,638) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:HA   | 18       | 0.76          |
| (1,638) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:HA   | 20       | 0.76          |
| (1,588) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.76          |
| (1,588) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.76          |
| (1,588) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.76          |
| (1,588) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.76          |
| (1,588) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.76          |
| (1,588) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.76          |
| (1,588) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.76          |
| (1,588) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.76          |
| (1,588) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.76          |
| (1,588) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.76          |
| (1,588) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.76          |
| (1,588) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.76          |
| (1,587) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.76          |
| (1,587) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.76          |
| (1,587) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.76          |
| (1,587) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.76          |
| (1,587) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.76          |
| (1,587) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.76          |
| (1,587) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.76          |
| (1,587) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.76          |
| (1,587) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.76          |
| (1,587) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.76          |
| (1,587) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.76          |
| (1,587) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.76          |
| (1,638) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:HA   | 19       | 0.75          |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:14:GLN:H    | 1        | 0.73          |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:14:GLN:H    | 2        | 0.73          |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:14:GLN:H    | 3        | 0.73          |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:14:GLN:H    | 5        | 0.73          |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:14:GLN:H    | 6        | 0.73          |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:14:GLN:H    | 7        | 0.73          |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:14:GLN:H    | 9        | 0.73          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:14:GLN:H  | 10       | 0.73          |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:14:GLN:H  | 11       | 0.73          |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:14:GLN:H  | 12       | 0.73          |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:14:GLN:H  | 13       | 0.73          |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:14:GLN:H  | 14       | 0.73          |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:14:GLN:H  | 16       | 0.73          |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:14:GLN:H  | 17       | 0.73          |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:14:GLN:H  | 18       | 0.73          |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:14:GLN:H  | 19       | 0.73          |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:14:GLN:H  | 20       | 0.73          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HA | 11       | 0.71          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HA | 11       | 0.71          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HA | 11       | 0.71          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HA | 11       | 0.71          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HA | 11       | 0.71          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HA | 11       | 0.71          |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:14:GLN:H  | 15       | 0.69          |
| (1,638) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:14:GLN:HA | 15       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HA | 1        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HA | 1        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HA | 1        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HA | 1        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HA | 1        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HA | 1        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HA | 2        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HA | 2        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HA | 2        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HA | 2        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HA | 2        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HA | 2        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HA | 3        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HA | 3        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HA | 3        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HA | 3        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HA | 3        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HA | 3        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HA | 5        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HA | 5        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HA | 5        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HA | 5        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HA | 5        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HA | 5        | 0.67          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HA | 6        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HA | 6        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HA | 6        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HA | 6        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HA | 6        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HA | 6        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HA | 7        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HA | 7        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HA | 7        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HA | 7        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HA | 7        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HA | 7        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HA | 9        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HA | 9        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HA | 9        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HA | 9        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HA | 9        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HA | 9        | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HA | 10       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HA | 10       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HA | 10       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HA | 10       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HA | 10       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HA | 10       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HA | 12       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HA | 12       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HA | 12       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HA | 12       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HA | 12       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HA | 12       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HA | 13       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HA | 13       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HA | 13       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HA | 13       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HA | 13       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HA | 13       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HA | 14       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HA | 14       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HA | 14       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HA | 14       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HA | 14       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HA | 14       | 0.67          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HA   | 16       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HA   | 16       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HA   | 16       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HA   | 16       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HA   | 16       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HA   | 16       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HA   | 17       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HA   | 17       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HA   | 17       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HA   | 17       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HA   | 17       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HA   | 17       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HA   | 18       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HA   | 18       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HA   | 18       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HA   | 18       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HA   | 18       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HA   | 18       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HA   | 19       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HA   | 19       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HA   | 19       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HA   | 19       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HA   | 19       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HA   | 19       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HA   | 20       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HA   | 20       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HA   | 20       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HA   | 20       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HA   | 20       | 0.67          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HA   | 20       | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.67          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.67          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.67          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HA    | 4        | 0.67          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HA    | 4        | 0.67          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HA    | 8        | 0.67          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HA    | 8        | 0.67          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:H    | 1        | 0.66          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:H    | 2        | 0.66          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:H    | 3        | 0.66          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:H    | 5        | 0.66          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:H    | 6        | 0.66          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:H    | 7        | 0.66          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:H    | 9        | 0.66          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:H    | 10       | 0.66          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:H    | 11       | 0.66          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:H    | 13       | 0.66          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:H    | 14       | 0.66          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:H    | 16       | 0.66          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:H    | 17       | 0.66          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:H    | 18       | 0.66          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:H    | 19       | 0.66          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:H    | 20       | 0.66          |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:H    | 1        | 0.66          |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:H    | 2        | 0.66          |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:H    | 3        | 0.66          |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:H    | 5        | 0.66          |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:H    | 6        | 0.66          |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:H    | 7        | 0.66          |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:H    | 9        | 0.66          |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:H    | 10       | 0.66          |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:H    | 11       | 0.66          |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:H    | 12       | 0.66          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:H    | 13       | 0.66          |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:H    | 14       | 0.66          |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:H    | 16       | 0.66          |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:H    | 17       | 0.66          |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:H    | 18       | 0.66          |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:H    | 19       | 0.66          |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.66          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.66          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.66          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.66          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O     | 1:A:13:LEU:H    | 12       | 0.65          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O     | 1:A:13:LEU:H    | 15       | 0.65          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2  | 1:A:16:LYS:H    | 15       | 0.65          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3  | 1:A:16:LYS:H    | 15       | 0.65          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.65          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.65          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.65          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.65          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.65          |
| (1,548) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.65          |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HE    | 9        | 0.64          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HA   | 11       | 0.64          |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HE    | 3        | 0.63          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HA   | 15       | 0.63          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HA   | 15       | 0.63          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HA   | 15       | 0.63          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HA   | 15       | 0.63          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HA   | 15       | 0.63          |
| (1,631) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HA   | 15       | 0.63          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HA   | 11       | 0.63          |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HE    | 5        | 0.62          |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HE    | 15       | 0.62          |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HE    | 20       | 0.62          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2  | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.62          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3  | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.62          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HA   | 1        | 0.62          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HA   | 2        | 0.62          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HA   | 3        | 0.62          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HA   | 5        | 0.62          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HA   | 6        | 0.62          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HA   | 7        | 0.62          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HA   | 9        | 0.62          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HA   | 10       | 0.62          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HA   | 12       | 0.62          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HA   | 13       | 0.62          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HA   | 14       | 0.62          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HA   | 16       | 0.62          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HA   | 17       | 0.62          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HA   | 18       | 0.62          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HA   | 19       | 0.62          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB   | 1:A:13:LEU:HA   | 20       | 0.62          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.62          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.62          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.62          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.62          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.62          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.62          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.62          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.62          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.62          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.62          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.62          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.62          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.62          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.62          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.62          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.62          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.62          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.62          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.62          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.62          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.62          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.62          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.62          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.62          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HA   | 1        | 0.62          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HA   | 2        | 0.62          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HA   | 3        | 0.62          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HA   | 5        | 0.62          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HA   | 6        | 0.62          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HA   | 7        | 0.62          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HA   | 9        | 0.62          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HA   | 10       | 0.62          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HA   | 12       | 0.62          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HA   | 13       | 0.62          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HA   | 14       | 0.62          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HA   | 15       | 0.62          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HA   | 16       | 0.62          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HA   | 17       | 0.62          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HA   | 18       | 0.62          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HA   | 19       | 0.62          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HA   | 20       | 0.62          |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:N    | 1        | 0.61          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:N    | 2        | 0.61          |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:N    | 3        | 0.61          |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:N    | 5        | 0.61          |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:N    | 7        | 0.61          |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:N    | 11       | 0.61          |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:N    | 12       | 0.61          |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:N    | 15       | 0.61          |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O   | 1:A:10:ASP:N    | 20       | 0.61          |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:3:ARG:HE    | 11       | 0.61          |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:3:ARG:HE    | 14       | 0.61          |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:14:GLN:HE21 | 4        | 0.61          |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:14:GLN:HE22 | 4        | 0.61          |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:14:GLN:HE21 | 8        | 0.61          |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:14:GLN:HE22 | 8        | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 1        | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 1        | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 2        | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 2        | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 3        | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 3        | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 5        | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 5        | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 6        | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 6        | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 7        | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 7        | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 9        | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 9        | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 10       | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 10       | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 11       | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 11       | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 12       | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 12       | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 13       | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 13       | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 14       | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 14       | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 16       | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 16       | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 17       | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 17       | 0.61          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HB2 | 18       | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HB3 | 18       | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HB2 | 19       | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HB3 | 19       | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HB2 | 20       | 0.61          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HB3 | 20       | 0.61          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:10:ASP:H   | 4        | 0.61          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:10:ASP:H   | 4        | 0.61          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:10:ASP:H   | 8        | 0.61          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:10:ASP:H   | 8        | 0.61          |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 10       | 0.61          |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O     | 1:A:10:ASP:N   | 6        | 0.6           |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O     | 1:A:10:ASP:N   | 9        | 0.6           |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O     | 1:A:10:ASP:N   | 10       | 0.6           |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O     | 1:A:10:ASP:N   | 13       | 0.6           |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O     | 1:A:10:ASP:N   | 14       | 0.6           |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O     | 1:A:10:ASP:N   | 16       | 0.6           |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O     | 1:A:10:ASP:N   | 17       | 0.6           |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O     | 1:A:10:ASP:N   | 18       | 0.6           |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O     | 1:A:10:ASP:N   | 19       | 0.6           |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H   | 15       | 0.6           |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H   | 15       | 0.6           |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 15       | 0.6           |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H   | 15       | 0.6           |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H   | 15       | 0.6           |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H   | 15       | 0.6           |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H   | 15       | 0.6           |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H   | 15       | 0.6           |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 15       | 0.6           |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H   | 15       | 0.6           |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H   | 15       | 0.6           |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H   | 15       | 0.6           |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.6           |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:13:LEU:HB2 | 4        | 0.6           |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:13:LEU:HB3 | 4        | 0.6           |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:13:LEU:HB2 | 4        | 0.6           |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:13:LEU:HB3 | 4        | 0.6           |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:13:LEU:HB2 | 8        | 0.6           |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:13:LEU:HB3 | 8        | 0.6           |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:13:LEU:HB2 | 8        | 0.6           |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:13:LEU:HB3 | 8        | 0.6           |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 4        | 0.6           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:4:LEU:HG   | 8        | 0.6           |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:4:LEU:HG   | 18       | 0.6           |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE2 | 11       | 0.59          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE3 | 11       | 0.59          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 1        | 0.59          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 1        | 0.59          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.59          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.59          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 7        | 0.59          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 7        | 0.59          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.59          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.59          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB  | 1:A:13:LEU:HA  | 15       | 0.59          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:6:ALA:HA   | 17       | 0.59          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:6:ALA:HA   | 17       | 0.59          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HA  | 11       | 0.59          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HA  | 11       | 0.59          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HA  | 15       | 0.59          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HA  | 15       | 0.59          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HB2 | 15       | 0.59          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HB3 | 15       | 0.59          |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:4:LEU:HG   | 3        | 0.59          |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:4:LEU:HG   | 6        | 0.59          |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:4:LEU:HG   | 7        | 0.59          |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:4:LEU:HG   | 16       | 0.59          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 11       | 0.58          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 11       | 0.58          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 11       | 0.58          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 11       | 0.58          |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:17:LYS:H   | 11       | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 2        | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 2        | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 3        | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 3        | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 6        | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 6        | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 9        | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 9        | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 10       | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 10       | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 12       | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 12       | 0.58          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H    | 13       | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H    | 13       | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H    | 14       | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H    | 14       | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H    | 16       | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H    | 16       | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H    | 17       | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H    | 17       | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H    | 18       | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H    | 18       | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H    | 20       | 0.58          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H    | 20       | 0.58          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 4        | 0.58          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 4        | 0.58          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 8        | 0.58          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 8        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.58          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.58          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.58          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.58          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.58          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.58          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:9:ARG:HA    | 14       | 0.58          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:9:ARG:HA    | 14       | 0.58          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:9:ARG:HA    | 18       | 0.58          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:9:ARG:HA    | 18       | 0.58          |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 20       | 0.58          |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O    | 1:A:10:ASP:N    | 4        | 0.57          |
| (3,2)   | 1:A:6:ALA:O    | 1:A:10:ASP:N    | 8        | 0.57          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD2  | 11       | 0.57          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD3  | 11       | 0.57          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD2  | 15       | 0.57          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD3  | 15       | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HA   | 1        | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HA   | 1        | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HA   | 2        | 0.57          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HA   | 2        | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HA   | 3        | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HA   | 3        | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HA   | 5        | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HA   | 5        | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HA   | 6        | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HA   | 6        | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HA   | 7        | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HA   | 7        | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HA   | 9        | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HA   | 9        | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HA   | 10       | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HA   | 10       | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HA   | 12       | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HA   | 12       | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HA   | 13       | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HA   | 13       | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HA   | 14       | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HA   | 14       | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HA   | 16       | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HA   | 16       | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HA   | 17       | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HA   | 17       | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HA   | 18       | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HA   | 18       | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HA   | 20       | 0.57          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HA   | 20       | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.57          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.57          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.57          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.57          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.57          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.57          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.57          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.57          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.57          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.57          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.57          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.57          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.57          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.57          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.57          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.57          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.57          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.57          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.57          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.57          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HA    | 1        | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HA    | 1        | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HA    | 2        | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HA    | 2        | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HA    | 3        | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HA    | 3        | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HA    | 5        | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HA    | 5        | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HA    | 6        | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HA    | 6        | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HA    | 7        | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HA    | 7        | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HA    | 9        | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HA    | 9        | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HA    | 10       | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HA    | 10       | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HA    | 11       | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HA    | 11       | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HA    | 12       | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HA    | 12       | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HA    | 13       | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HA    | 13       | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HA    | 15       | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HA    | 15       | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HA    | 16       | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HA    | 16       | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HA    | 17       | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HA    | 17       | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HA    | 19       | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HA    | 19       | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HA    | 20       | 0.57          |
| (1,312) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HA    | 20       | 0.57          |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:4:LEU:HG    | 15       | 0.57          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O  | 1:A:14:GLN:H   | 4        | 0.56          |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O  | 1:A:14:GLN:H   | 8        | 0.56          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:H   | 4        | 0.56          |
| (3,7)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:H   | 8        | 0.56          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:3:ARG:HE   | 1        | 0.56          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:3:ARG:HE   | 1        | 0.56          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:3:ARG:HE   | 4        | 0.56          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:3:ARG:HE   | 4        | 0.56          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:3:ARG:HE   | 6        | 0.56          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:3:ARG:HE   | 6        | 0.56          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:3:ARG:HE   | 7        | 0.56          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:3:ARG:HE   | 7        | 0.56          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:3:ARG:HE   | 8        | 0.56          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:3:ARG:HE   | 8        | 0.56          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:3:ARG:HE   | 10       | 0.56          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:3:ARG:HE   | 10       | 0.56          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:3:ARG:HE   | 18       | 0.56          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:3:ARG:HE   | 18       | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 1        | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 1        | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 2        | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 2        | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 3        | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 3        | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 5        | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 5        | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 6        | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 6        | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 7        | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 7        | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 10       | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 10       | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 12       | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 12       | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 13       | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 13       | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 14       | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 14       | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 16       | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 16       | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 17       | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 17       | 0.56          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD2  | 19       | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD3  | 19       | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD2  | 20       | 0.56          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD3  | 20       | 0.56          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA   | 11       | 0.56          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA   | 11       | 0.56          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA   | 11       | 0.56          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:6:ALA:HA    | 5        | 0.56          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:6:ALA:HA    | 5        | 0.56          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:13:LEU:HA   | 19       | 0.56          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:13:LEU:HA   | 19       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.56          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.56          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.56          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.56          |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HA   | 11       | 0.56          |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H    | 15       | 0.56          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.56          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.56          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.56          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.56          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.56          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.56          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.56          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.56          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.56          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.56          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.56          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.56          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.56          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.56          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.56          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.56          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.56          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.56          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.56          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.56          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.56          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HA   | 4        | 0.56          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HA   | 8        | 0.56          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA    | 4        | 0.56          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA    | 4        | 0.56          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA    | 8        | 0.56          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA    | 8        | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:HB2  | 3        | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:HB3  | 3        | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:HB2  | 3        | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:HB3  | 3        | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:HB2  | 3        | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:HB3  | 3        | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:HB2  | 15       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:HB3  | 15       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:HB2  | 15       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:HB3  | 15       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:HB2  | 15       | 0.56          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:HB3 | 15       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:10:ASP:HB2 | 16       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:10:ASP:HB3 | 16       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:10:ASP:HB2 | 16       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:10:ASP:HB3 | 16       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:HB2 | 16       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:HB3 | 16       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:10:ASP:HB2 | 18       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:10:ASP:HB3 | 18       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:10:ASP:HB2 | 18       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:10:ASP:HB3 | 18       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:HB2 | 18       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:HB3 | 18       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:10:ASP:HB2 | 20       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:10:ASP:HB3 | 20       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:10:ASP:HB2 | 20       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:10:ASP:HB3 | 20       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:HB2 | 20       | 0.56          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:HB3 | 20       | 0.56          |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:4:LEU:HG   | 1        | 0.56          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:3:ARG:HE   | 2        | 0.55          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:3:ARG:HE   | 2        | 0.55          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:3:ARG:HE   | 12       | 0.55          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:3:ARG:HE   | 12       | 0.55          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:3:ARG:HE   | 13       | 0.55          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:3:ARG:HE   | 13       | 0.55          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:3:ARG:HE   | 16       | 0.55          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:3:ARG:HE   | 16       | 0.55          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:3:ARG:HE   | 17       | 0.55          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:3:ARG:HE   | 17       | 0.55          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:3:ARG:HE   | 19       | 0.55          |
| (1,75)  | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:3:ARG:HE   | 19       | 0.55          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 15       | 0.55          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 15       | 0.55          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 15       | 0.55          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 15       | 0.55          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HA  | 12       | 0.55          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HA  | 12       | 0.55          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD2 | 4        | 0.55          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD3 | 4        | 0.55          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD2 | 8        | 0.55          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD3 | 8        | 0.55          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD2 | 9        | 0.55          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD3 | 9        | 0.55          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD2 | 18       | 0.55          |
| (1,682) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD3 | 18       | 0.55          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2  | 1:A:16:LYS:H   | 15       | 0.55          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3  | 1:A:16:LYS:H   | 15       | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H   | 7        | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H   | 7        | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 7        | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H   | 7        | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H   | 7        | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H   | 7        | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.55          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H   | 7        | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H   | 7        | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 7        | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H   | 7        | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H   | 7        | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H   | 7        | 0.55          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H  | 19       | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H  | 19       | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H  | 19       | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H  | 19       | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H  | 19       | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H  | 19       | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H  | 20       | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H  | 20       | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H  | 20       | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H  | 20       | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H  | 20       | 0.55          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H  | 20       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA | 1        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA | 1        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA | 1        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA | 2        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA | 2        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA | 2        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA | 3        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA | 3        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA | 3        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA | 5        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA | 5        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA | 5        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA | 6        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA | 6        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA | 6        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA | 7        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA | 7        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA | 7        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA | 9        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA | 9        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA | 9        | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA | 10       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA | 10       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA | 10       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA | 12       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA | 12       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA | 12       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA | 13       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA | 13       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA | 13       | 0.55          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA  | 14       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA  | 14       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA  | 14       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA  | 16       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA  | 16       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA  | 16       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA  | 17       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA  | 17       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA  | 17       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA  | 18       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA  | 18       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA  | 18       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA  | 19       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA  | 19       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA  | 19       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA  | 20       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA  | 20       | 0.55          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA  | 20       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG2 | 1        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG3 | 1        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG2 | 1        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG3 | 1        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG2 | 2        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG3 | 2        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG2 | 2        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG3 | 2        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG2 | 3        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG3 | 3        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG2 | 3        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG3 | 3        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG2 | 6        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG3 | 6        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG2 | 6        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG3 | 6        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG2 | 7        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG3 | 7        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG2 | 7        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG3 | 7        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG2 | 9        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG3 | 9        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG2 | 9        | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG3 | 9        | 0.55          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 10       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 10       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 10       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 10       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 11       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 11       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 11       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 11       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 12       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 12       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 12       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 12       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 13       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 13       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 13       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 13       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 14       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 14       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 14       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 14       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 16       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 16       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 16       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 16       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 17       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 17       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 17       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 17       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 18       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 18       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 18       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 18       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 19       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 19       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 19       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 19       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 20       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 20       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 20       | 0.55          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 20       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 1        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 1        | 0.55          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 1        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 1        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 2        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 2        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 2        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 2        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 3        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 3        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 3        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 3        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 6        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 6        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 6        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 6        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 7        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 7        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 7        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 7        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 9        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 9        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 9        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 9        | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 10       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 10       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 10       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 10       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 11       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 11       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 11       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 11       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 12       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 12       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 12       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 12       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 13       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 13       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 13       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 13       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 14       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 14       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 14       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 14       | 0.55          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 16       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 16       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2  | 16       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3  | 16       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 17       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 17       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2  | 17       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3  | 17       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 18       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 18       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2  | 18       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3  | 18       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 19       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 19       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2  | 19       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3  | 19       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 20       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 20       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2  | 20       | 0.55          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3  | 20       | 0.55          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:6:ALA:HA    | 2        | 0.55          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:6:ALA:HA    | 2        | 0.55          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:6:ALA:HA    | 13       | 0.55          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:6:ALA:HA    | 13       | 0.55          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.55          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.55          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.55          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.55          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.55          |
| (1,547) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.55          |
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HA   | 4        | 0.55          |
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HA   | 8        | 0.55          |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HA   | 1        | 0.55          |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HA   | 3        | 0.55          |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HA   | 5        | 0.55          |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HA   | 6        | 0.55          |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HA   | 7        | 0.55          |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HA   | 9        | 0.55          |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HA   | 12       | 0.55          |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HA   | 14       | 0.55          |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HA   | 16       | 0.55          |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HA   | 17       | 0.55          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HA  | 19       | 0.55          |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HA  | 20       | 0.55          |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H   | 4        | 0.55          |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H   | 8        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 1        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 1        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 1        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 1        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 2        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 2        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 2        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 2        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 3        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 3        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 3        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 3        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 4        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 4        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 4        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 4        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 5        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 5        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 5        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 5        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 7        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 7        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 7        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 7        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 8        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 8        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 8        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 8        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 9        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 9        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 9        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 9        | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 10       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 10       | 0.55          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 10       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 10       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 11       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 11       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 11       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 11       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 12       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 12       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 12       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 12       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 13       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 13       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 13       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 13       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 14       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 14       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 14       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 14       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 15       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 15       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 15       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 15       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 16       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 16       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 16       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 16       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 17       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 17       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 17       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 17       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 18       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 18       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 18       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 18       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 19       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 19       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 19       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 19       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 20       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 20       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 20       | 0.55          |
| (1,403) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 20       | 0.55          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.55          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.55          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.55          |
| (1,359) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 2        | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 2        | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 2        | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 2        | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 2        | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 2        | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 2        | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 2        | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 2        | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 2        | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 2        | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 2        | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 13       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 13       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 13       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 13       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 13       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 13       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 13       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 13       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 13       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 13       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 13       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 13       | 0.55          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 14       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 14       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 14       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 14       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 14       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 14       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 14       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 14       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 14       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 14       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 14       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 14       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 19       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 19       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 19       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 19       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 19       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 19       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 19       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 19       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 19       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 19       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 19       | 0.55          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 19       | 0.55          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HA  | 1        | 0.55          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HA  | 2        | 0.55          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HA  | 3        | 0.55          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HA  | 6        | 0.55          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HA  | 7        | 0.55          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HA  | 9        | 0.55          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HA  | 10       | 0.55          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HA  | 11       | 0.55          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HA  | 13       | 0.55          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HA  | 14       | 0.55          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HA  | 15       | 0.55          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HA  | 16       | 0.55          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HA  | 17       | 0.55          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HA  | 18       | 0.55          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HA  | 20       | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 1        | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 1        | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 1        | 0.55          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:10:ASP:HB3 | 1        | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:HB2 | 1        | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:HB3 | 1        | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:10:ASP:HB2 | 6        | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:10:ASP:HB3 | 6        | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:10:ASP:HB2 | 6        | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:10:ASP:HB3 | 6        | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:HB2 | 6        | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:HB3 | 6        | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:10:ASP:HB2 | 7        | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:10:ASP:HB3 | 7        | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:10:ASP:HB2 | 7        | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:10:ASP:HB3 | 7        | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:HB2 | 7        | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:HB3 | 7        | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:10:ASP:HB2 | 10       | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:10:ASP:HB3 | 10       | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:10:ASP:HB2 | 10       | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:10:ASP:HB3 | 10       | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:HB2 | 10       | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:HB3 | 10       | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:10:ASP:HB2 | 11       | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:10:ASP:HB3 | 11       | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:10:ASP:HB2 | 11       | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:10:ASP:HB3 | 11       | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:HB2 | 11       | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:HB3 | 11       | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:10:ASP:HB2 | 12       | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:10:ASP:HB3 | 12       | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:10:ASP:HB2 | 12       | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:10:ASP:HB3 | 12       | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:HB2 | 12       | 0.55          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:10:ASP:HB3 | 12       | 0.55          |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:4:LEU:HG   | 11       | 0.55          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 4        | 0.54          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 4        | 0.54          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 4        | 0.54          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 4        | 0.54          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 8        | 0.54          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 8        | 0.54          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 8        | 0.54          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 8        | 0.54          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HA | 1        | 0.54          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HA | 1        | 0.54          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HA | 7        | 0.54          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HA | 7        | 0.54          |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HE  | 19       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H  | 1        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H  | 1        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H  | 1        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H  | 1        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H  | 1        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H  | 1        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H  | 2        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H  | 2        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H  | 2        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H  | 2        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H  | 2        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H  | 2        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H  | 3        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H  | 3        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H  | 3        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H  | 3        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H  | 3        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H  | 3        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H  | 6        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H  | 6        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H  | 6        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H  | 6        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H  | 6        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H  | 6        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H  | 9        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H  | 9        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H  | 9        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H  | 9        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H  | 9        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H  | 9        | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H  | 10       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H  | 10       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H  | 10       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H  | 10       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H  | 10       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H  | 10       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H  | 11       | 0.54          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|--------------|----------|---------------|
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 11       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 11       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H | 11       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H | 11       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H | 11       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 12       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 12       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 12       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H | 12       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H | 12       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H | 12       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 13       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 13       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 13       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H | 13       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H | 13       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H | 13       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 14       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 14       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 14       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H | 14       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H | 14       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H | 14       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 16       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 16       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 16       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H | 16       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H | 16       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H | 16       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 17       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 17       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 17       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H | 17       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H | 17       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H | 17       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 18       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 18       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 18       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H | 18       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H | 18       | 0.54          |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H | 18       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 1        | 0.54          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|--------------|----------|---------------|
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 1        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 1        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H | 1        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H | 1        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H | 1        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 2        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 2        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 2        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H | 2        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H | 2        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H | 2        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 3        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 3        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 3        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H | 3        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H | 3        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H | 3        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 6        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 6        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 6        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H | 6        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H | 6        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H | 6        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 9        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 9        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 9        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H | 9        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H | 9        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H | 9        | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 10       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 10       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 10       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H | 10       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H | 10       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H | 10       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 11       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 11       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 11       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H | 11       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H | 11       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H | 11       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 12       | 0.54          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H   | 12       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 12       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H   | 12       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H   | 12       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H   | 12       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H   | 13       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H   | 13       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 13       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H   | 13       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H   | 13       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H   | 13       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H   | 14       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H   | 14       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 14       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H   | 14       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H   | 14       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H   | 14       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H   | 16       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H   | 16       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 16       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H   | 16       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H   | 16       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H   | 16       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H   | 17       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H   | 17       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 17       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H   | 17       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H   | 17       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H   | 17       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H   | 18       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H   | 18       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 18       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H   | 18       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H   | 18       | 0.54          |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H   | 18       | 0.54          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 15       | 0.54          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 15       | 0.54          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 15       | 0.54          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 15       | 0.54          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 15       | 0.54          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 15       | 0.54          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 15       | 0.54          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 15       | 0.54          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 15       | 0.54          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 15       | 0.54          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 15       | 0.54          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 15       | 0.54          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA  | 15       | 0.54          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA  | 15       | 0.54          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA  | 15       | 0.54          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG2 | 5        | 0.54          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG3 | 5        | 0.54          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG2 | 5        | 0.54          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG3 | 5        | 0.54          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG2 | 5        | 0.54          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG3 | 5        | 0.54          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG2 | 5        | 0.54          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG3 | 5        | 0.54          |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:H   | 15       | 0.54          |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:H   | 15       | 0.54          |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:6:ALA:HA   | 17       | 0.54          |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:13:LEU:HA  | 2        | 0.54          |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:13:LEU:HA  | 4        | 0.54          |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:13:LEU:HA  | 8        | 0.54          |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:13:LEU:HA  | 10       | 0.54          |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:13:LEU:HA  | 13       | 0.54          |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:13:LEU:HA  | 18       | 0.54          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:HD11 | 5        | 0.54          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:HD12 | 5        | 0.54          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:HD13 | 5        | 0.54          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:HD21 | 5        | 0.54          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:HD22 | 5        | 0.54          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:HD23 | 5        | 0.54          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:HD11 | 5        | 0.54          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:HD12 | 5        | 0.54          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:HD13 | 5        | 0.54          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:HD21 | 5        | 0.54          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:HD22 | 5        | 0.54          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3   | 1:A:4:LEU:HD23 | 5        | 0.54          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:11:PHE:HA  | 5        | 0.54          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:11:PHE:HA  | 12       | 0.54          |
| (1,335) | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:11:PHE:HA  | 19       | 0.54          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:4:LEU:HG   | 9        | 0.54          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:4:LEU:HG   | 9        | 0.54          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1   | 1:A:10:ASP:HB2 | 5        | 0.54          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1   | 1:A:10:ASP:HB3 | 5        | 0.54          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2   | 1:A:10:ASP:HB2 | 5        | 0.54          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2   | 1:A:10:ASP:HB3 | 5        | 0.54          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3   | 1:A:10:ASP:HB2 | 5        | 0.54          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3   | 1:A:10:ASP:HB3 | 5        | 0.54          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1   | 1:A:10:ASP:HB2 | 17       | 0.54          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1   | 1:A:10:ASP:HB3 | 17       | 0.54          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2   | 1:A:10:ASP:HB2 | 17       | 0.54          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2   | 1:A:10:ASP:HB3 | 17       | 0.54          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3   | 1:A:10:ASP:HB2 | 17       | 0.54          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3   | 1:A:10:ASP:HB3 | 17       | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB2 | 1        | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB3 | 1        | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB2 | 2        | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB3 | 2        | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB2 | 5        | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB3 | 5        | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB2 | 6        | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB3 | 6        | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB2 | 13       | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB3 | 13       | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB2 | 14       | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB3 | 14       | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB2 | 15       | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB3 | 15       | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB2 | 17       | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB3 | 17       | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB2 | 18       | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB3 | 18       | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB2 | 19       | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB3 | 19       | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB2 | 20       | 0.54          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA    | 1:A:10:ASP:HB3 | 20       | 0.54          |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 12       | 0.54          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2   | 1:A:6:ALA:HB1  | 9        | 0.54          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2   | 1:A:6:ALA:HB2  | 9        | 0.54          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2   | 1:A:6:ALA:HB3  | 9        | 0.54          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3   | 1:A:6:ALA:HB1  | 9        | 0.54          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3   | 1:A:6:ALA:HB2  | 9        | 0.54          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3   | 1:A:6:ALA:HB3  | 9        | 0.54          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 15       | 0.53          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 15       | 0.53          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 15       | 0.53          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 15       | 0.53          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 15       | 0.53          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 15       | 0.53          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 15       | 0.53          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 15       | 0.53          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 15       | 0.53          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 15       | 0.53          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 15       | 0.53          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 15       | 0.53          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HA  | 5        | 0.53          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HA  | 5        | 0.53          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H    | 1:A:16:LYS:HE2 | 4        | 0.53          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H    | 1:A:16:LYS:HE3 | 4        | 0.53          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H    | 1:A:16:LYS:HE2 | 8        | 0.53          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H    | 1:A:16:LYS:HE3 | 8        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 4        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 4        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 4        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 4        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 4        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 4        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 4        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 4        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 4        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 4        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 4        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 4        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 8        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 8        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 8        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 8        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 8        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 8        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 8        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 8        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 8        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 8        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 8        | 0.53          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 8        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 4        | 0.53          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 4        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 4        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 4        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 4        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 4        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 4        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 4        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 4        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 4        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 4        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 4        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 8        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 8        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 8        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 8        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 8        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 8        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 8        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 8        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 8        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 8        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 8        | 0.53          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 8        | 0.53          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG2 | 4        | 0.53          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG3 | 4        | 0.53          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG2 | 4        | 0.53          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG3 | 4        | 0.53          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG2 | 8        | 0.53          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG3 | 8        | 0.53          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG2 | 8        | 0.53          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG3 | 8        | 0.53          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG2 | 15       | 0.53          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG3 | 15       | 0.53          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG2 | 15       | 0.53          |
| (1,562) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG3 | 15       | 0.53          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG2 | 4        | 0.53          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG3 | 4        | 0.53          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG2 | 4        | 0.53          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG3 | 4        | 0.53          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG2 | 8        | 0.53          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:15:ARG:HG3 | 8        | 0.53          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:15:ARG:HG2 | 8        | 0.53          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 8        | 0.53          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 15       | 0.53          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 15       | 0.53          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG2 | 15       | 0.53          |
| (1,561) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:15:ARG:HG3 | 15       | 0.53          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H   | 4        | 0.53          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H   | 4        | 0.53          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H   | 8        | 0.53          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H   | 8        | 0.53          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:6:ALA:HA   | 14       | 0.53          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:6:ALA:HA   | 14       | 0.53          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:6:ALA:HA   | 19       | 0.53          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:6:ALA:HA   | 19       | 0.53          |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:H   | 11       | 0.53          |
| (1,504) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 4        | 0.53          |
| (1,504) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 4        | 0.53          |
| (1,504) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 8        | 0.53          |
| (1,504) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 8        | 0.53          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2  | 1:A:4:LEU:HD11 | 17       | 0.53          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2  | 1:A:4:LEU:HD12 | 17       | 0.53          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2  | 1:A:4:LEU:HD13 | 17       | 0.53          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2  | 1:A:4:LEU:HD21 | 17       | 0.53          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2  | 1:A:4:LEU:HD22 | 17       | 0.53          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2  | 1:A:4:LEU:HD23 | 17       | 0.53          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3  | 1:A:4:LEU:HD11 | 17       | 0.53          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3  | 1:A:4:LEU:HD12 | 17       | 0.53          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3  | 1:A:4:LEU:HD13 | 17       | 0.53          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3  | 1:A:4:LEU:HD21 | 17       | 0.53          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3  | 1:A:4:LEU:HD22 | 17       | 0.53          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3  | 1:A:4:LEU:HD23 | 17       | 0.53          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:10:ASP:H   | 1        | 0.53          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:10:ASP:H   | 1        | 0.53          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:10:ASP:H   | 6        | 0.53          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:10:ASP:H   | 6        | 0.53          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:10:ASP:H   | 9        | 0.53          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:10:ASP:H   | 9        | 0.53          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:10:ASP:H   | 13       | 0.53          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:10:ASP:H   | 13       | 0.53          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:10:ASP:H   | 20       | 0.53          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:10:ASP:H   | 20       | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:10:ASP:HB2 | 2        | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:10:ASP:HB3 | 2        | 0.53          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 2        | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 2        | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:HB2 | 2        | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:HB3 | 2        | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 9        | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 9        | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 9        | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 9        | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:HB2 | 9        | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:HB3 | 9        | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 13       | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 13       | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 13       | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 13       | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:HB2 | 13       | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:HB3 | 13       | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 14       | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 14       | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 14       | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 14       | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:HB2 | 14       | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:HB3 | 14       | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 19       | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 19       | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 19       | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 19       | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:HB2 | 19       | 0.53          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:HB3 | 19       | 0.53          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 3        | 0.53          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 3        | 0.53          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 7        | 0.53          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 7        | 0.53          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 9        | 0.53          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 9        | 0.53          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 10       | 0.53          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 10       | 0.53          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 11       | 0.53          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 11       | 0.53          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 12       | 0.53          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 12       | 0.53          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 16       | 0.53          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 16       | 0.53          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2   | 1:A:7:PHE:HA    | 1        | 0.53          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3   | 1:A:7:PHE:HA    | 1        | 0.53          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA   | 15       | 0.52          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA   | 15       | 0.52          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA   | 15       | 0.52          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA   | 15       | 0.52          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA   | 15       | 0.52          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA   | 15       | 0.52          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HA   | 19       | 0.52          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HA   | 19       | 0.52          |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:17:LYS:H    | 4        | 0.52          |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:17:LYS:H    | 8        | 0.52          |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:17:LYS:H    | 15       | 0.52          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:16:LYS:HG2  | 12       | 0.52          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:16:LYS:HG3  | 12       | 0.52          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:16:LYS:HG2  | 17       | 0.52          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:16:LYS:HG3  | 17       | 0.52          |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HE    | 12       | 0.52          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2  | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.52          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3  | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.52          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD2   | 9        | 0.52          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD3   | 9        | 0.52          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD2   | 14       | 0.52          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD3   | 14       | 0.52          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.52          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.52          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.52          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.52          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.52          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.52          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.52          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.52          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.52          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.52          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.52          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.52          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:6:ALA:HA    | 1        | 0.52          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:6:ALA:HA    | 1        | 0.52          |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:6:ALA:HA    | 2        | 0.52          |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:6:ALA:HA    | 5        | 0.52          |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:6:ALA:HA    | 13       | 0.52          |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:6:ALA:HA    | 19       | 0.52          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:14:GLN:H   | 18       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1        | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1        | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 2        | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 2        | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 3        | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 3        | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 5        | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 5        | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 6        | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 6        | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 7        | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 7        | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 9        | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 9        | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 10       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 10       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 11       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 11       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 12       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 12       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 13       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 13       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 14       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 14       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 15       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 15       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 16       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 17       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 17       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 19       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 19       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.52          |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.52          |
| (1,456) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HA  | 15       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H   | 1        | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H   | 1        | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H   | 2        | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H   | 2        | 0.52          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H  | 3        | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 3        | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H  | 5        | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 5        | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H  | 6        | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 6        | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H  | 7        | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 7        | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H  | 9        | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 9        | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H  | 10       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 10       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H  | 11       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 11       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H  | 12       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 12       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H  | 13       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 13       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H  | 14       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 14       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H  | 15       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 15       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H  | 16       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 16       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H  | 17       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 17       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H  | 18       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 18       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H  | 19       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 19       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H  | 20       | 0.52          |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 20       | 0.52          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H  | 6        | 0.52          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H  | 13       | 0.52          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H  | 14       | 0.52          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H  | 18       | 0.52          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H  | 20       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 1        | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 1        | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 2        | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 2        | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 3        | 0.52          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 3        | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 4        | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 4        | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 5        | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 5        | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 6        | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 6        | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 7        | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 7        | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 8        | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 8        | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 9        | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 9        | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 10       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 10       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 11       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 11       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 12       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 12       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 13       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 13       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 14       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 14       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 15       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 15       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 16       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 16       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 17       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 17       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 18       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 18       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 19       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 19       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HA | 20       | 0.52          |
| (1,329) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HA | 20       | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 2        | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 2        | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 3        | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 3        | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 5        | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 5        | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 7        | 0.52          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 7        | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 10       | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 10       | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 11       | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 11       | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 12       | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 12       | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 14       | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 14       | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 15       | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 15       | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 16       | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 16       | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 17       | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 17       | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 18       | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 18       | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 19       | 0.52          |
| (1,319) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 19       | 0.52          |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA  | 4        | 0.52          |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA  | 8        | 0.52          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HD1 | 11       | 0.52          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HD2 | 11       | 0.52          |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:4:LEU:HG  | 9        | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HA  | 3        | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HA  | 3        | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HA  | 4        | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HA  | 4        | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HA  | 5        | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HA  | 5        | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HA  | 6        | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HA  | 6        | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HA  | 7        | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HA  | 7        | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HA  | 8        | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HA  | 8        | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HA  | 10       | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HA  | 10       | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HA  | 11       | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HA  | 11       | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HA  | 12       | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HA  | 12       | 0.52          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HA    | 13       | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HA    | 13       | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HA    | 14       | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HA    | 14       | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HA    | 15       | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HA    | 15       | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HA    | 16       | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HA    | 16       | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HA    | 18       | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HA    | 18       | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HA    | 20       | 0.52          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HA    | 20       | 0.52          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 2        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 2        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 2        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 2        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 2        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 2        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 3        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 3        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 3        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 3        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 3        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 3        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 5        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 5        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 5        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.51          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key   | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|-------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 5        | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 5        | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 5        | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 10       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 10       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 10       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 10       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 10       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 10       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 14       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 14       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 14       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 14       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 14       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 14       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 15       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 15       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 15       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 15       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 15       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 15       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.51          |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.51          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HD11 | 18       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HD12 | 18       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HD13 | 18       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HD11 | 18       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HD12 | 18       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HD13 | 18       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HD11 | 19       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HD12 | 19       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HD13 | 19       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HD11 | 19       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HD12 | 19       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HD13 | 19       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.51          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.51          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG2  | 3        | 0.51          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG3  | 3        | 0.51          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG2  | 3        | 0.51          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG3  | 3        | 0.51          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG2  | 9        | 0.51          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG3  | 9        | 0.51          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG2  | 9        | 0.51          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG3  | 9        | 0.51          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG2  | 13       | 0.51          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG3  | 13       | 0.51          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG2  | 13       | 0.51          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG3  | 13       | 0.51          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG2  | 17       | 0.51          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG3  | 17       | 0.51          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG2  | 17       | 0.51          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG3  | 17       | 0.51          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG2  | 18       | 0.51          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG3  | 18       | 0.51          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 18       | 0.51          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 18       | 0.51          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HA  | 15       | 0.51          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HA  | 15       | 0.51          |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:17:LYS:H   | 1        | 0.51          |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:17:LYS:H   | 12       | 0.51          |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:17:LYS:H   | 19       | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG2 | 1        | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG3 | 1        | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG2 | 2        | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG3 | 2        | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG2 | 3        | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG3 | 3        | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG2 | 5        | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG3 | 5        | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG2 | 6        | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG3 | 6        | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG2 | 7        | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG3 | 7        | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG2 | 9        | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG3 | 9        | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG2 | 10       | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG3 | 10       | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG2 | 11       | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG3 | 11       | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG2 | 13       | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG3 | 13       | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG2 | 14       | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG3 | 14       | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG2 | 15       | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG3 | 15       | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG2 | 16       | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG3 | 16       | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG2 | 18       | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG3 | 18       | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG2 | 19       | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG3 | 19       | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG2 | 20       | 0.51          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG3 | 20       | 0.51          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HD2  | 5        | 0.51          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HD3  | 5        | 0.51          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:6:ALA:HA   | 6        | 0.51          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:6:ALA:HA  | 6        | 0.51          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:6:ALA:HA  | 7        | 0.51          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:6:ALA:HA  | 7        | 0.51          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:6:ALA:HA  | 18       | 0.51          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:6:ALA:HA  | 18       | 0.51          |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HA  | 14       | 0.51          |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:14:GLN:H  | 1        | 0.51          |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:14:GLN:H  | 2        | 0.51          |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:14:GLN:H  | 3        | 0.51          |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:14:GLN:H  | 5        | 0.51          |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:14:GLN:H  | 6        | 0.51          |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:14:GLN:H  | 7        | 0.51          |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:14:GLN:H  | 9        | 0.51          |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:14:GLN:H  | 10       | 0.51          |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:14:GLN:H  | 12       | 0.51          |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:14:GLN:H  | 13       | 0.51          |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:14:GLN:H  | 14       | 0.51          |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:14:GLN:H  | 16       | 0.51          |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:14:GLN:H  | 17       | 0.51          |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:14:GLN:H  | 19       | 0.51          |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:14:GLN:H  | 20       | 0.51          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HG | 1        | 0.51          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HG | 2        | 0.51          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HG | 3        | 0.51          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HG | 5        | 0.51          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HG | 6        | 0.51          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HG | 7        | 0.51          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HG | 9        | 0.51          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HG | 10       | 0.51          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HG | 11       | 0.51          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HG | 12       | 0.51          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HG | 13       | 0.51          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HG | 14       | 0.51          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HG | 16       | 0.51          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HG | 17       | 0.51          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HG | 18       | 0.51          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HG | 19       | 0.51          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HG | 20       | 0.51          |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H  | 1        | 0.51          |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H  | 2        | 0.51          |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H  | 3        | 0.51          |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H  | 5        | 0.51          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H | 6        | 0.51          |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H | 7        | 0.51          |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H | 9        | 0.51          |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H | 10       | 0.51          |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H | 11       | 0.51          |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H | 12       | 0.51          |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H | 13       | 0.51          |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H | 14       | 0.51          |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H | 16       | 0.51          |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H | 17       | 0.51          |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H | 18       | 0.51          |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H | 19       | 0.51          |
| (1,413) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H | 20       | 0.51          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H   | 1:A:12:ILE:H | 15       | 0.51          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H | 4        | 0.51          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H | 4        | 0.51          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H | 8        | 0.51          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H | 8        | 0.51          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H | 1        | 0.51          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H | 2        | 0.51          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H | 3        | 0.51          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H | 5        | 0.51          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H | 7        | 0.51          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H | 9        | 0.51          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H | 10       | 0.51          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H | 11       | 0.51          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H | 12       | 0.51          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H | 15       | 0.51          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H | 16       | 0.51          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H | 17       | 0.51          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H | 19       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA | 1        | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA | 1        | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA | 2        | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA | 2        | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA | 3        | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA | 3        | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA | 5        | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA | 5        | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA | 6        | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA | 6        | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA | 7        | 0.51          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA   | 7        | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA   | 9        | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA   | 9        | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA   | 10       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA   | 10       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA   | 11       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA   | 11       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA   | 12       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA   | 12       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA   | 13       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA   | 13       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA   | 14       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA   | 14       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA   | 15       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA   | 15       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA   | 16       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA   | 16       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA   | 17       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA   | 17       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA   | 18       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA   | 18       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA   | 19       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA   | 19       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:9:ARG:HA   | 20       | 0.51          |
| (1,311) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:9:ARG:HA   | 20       | 0.51          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 4        | 0.51          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 4        | 0.51          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 4        | 0.51          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 4        | 0.51          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:HB2 | 4        | 0.51          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:HB3 | 4        | 0.51          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 8        | 0.51          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 8        | 0.51          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 8        | 0.51          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 8        | 0.51          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:HB2 | 8        | 0.51          |
| (1,268) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:HB3 | 8        | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HD1  | 1        | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HD2  | 1        | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HD1  | 2        | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HD2  | 2        | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HD1  | 3        | 0.51          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD2 | 3        | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD1 | 5        | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD2 | 5        | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD1 | 6        | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD2 | 6        | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD1 | 7        | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD2 | 7        | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD1 | 9        | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD2 | 9        | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD1 | 10       | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD2 | 10       | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD1 | 12       | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD2 | 12       | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD1 | 14       | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD2 | 14       | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD1 | 15       | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD2 | 15       | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD1 | 16       | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD2 | 16       | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD1 | 18       | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD2 | 18       | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD1 | 19       | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD2 | 19       | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD1 | 20       | 0.51          |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA    | 1:A:7:PHE:HD2 | 20       | 0.51          |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:4:LEU:HG  | 17       | 0.51          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2   | 1:A:7:PHE:HA  | 2        | 0.51          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3   | 1:A:7:PHE:HA  | 2        | 0.51          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2   | 1:A:7:PHE:HA  | 17       | 0.51          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3   | 1:A:7:PHE:HA  | 17       | 0.51          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2   | 1:A:7:PHE:HA  | 19       | 0.51          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3   | 1:A:7:PHE:HA  | 19       | 0.51          |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:8:PHE:H   | 3        | 0.51          |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:8:PHE:H   | 10       | 0.51          |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:8:PHE:H   | 18       | 0.51          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:6:ALA:H   | 9        | 0.51          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:6:ALA:H   | 9        | 0.51          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA | 4        | 0.5           |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA | 4        | 0.5           |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA | 4        | 0.5           |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA | 4        | 0.5           |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA | 4        | 0.5           |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA   | 4        | 0.5           |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA   | 8        | 0.5           |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA   | 8        | 0.5           |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA   | 8        | 0.5           |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA   | 8        | 0.5           |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA   | 8        | 0.5           |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA   | 8        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HD11 | 1        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HD12 | 1        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HD13 | 1        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HD11 | 1        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HD12 | 1        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HD13 | 1        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HD11 | 6        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HD12 | 6        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HD13 | 6        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HD11 | 6        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HD12 | 6        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HD13 | 6        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HD11 | 7        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HD12 | 7        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HD13 | 7        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HD11 | 7        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HD12 | 7        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HD13 | 7        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.5           |
| (2,2)  | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.5           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key   | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|-------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 9        | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 9        | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 9        | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 9        | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 9        | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 9        | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 11       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 11       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 11       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 11       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 11       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 11       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 12       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 12       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 12       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 12       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 12       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 12       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 13       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 13       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 13       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.5           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key   | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|-------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 13       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 13       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 13       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 16       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 16       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 16       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 16       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 16       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 16       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 17       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 17       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 17       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 17       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 17       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 17       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 20       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 20       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 20       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 20       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 20       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 20       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.5           |
| (2,2) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.5           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.5           |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H    | 1:A:17:LYS:H    | 1        | 0.5           |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H    | 1:A:17:LYS:H    | 12       | 0.5           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HG2  | 2        | 0.5           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HG3  | 2        | 0.5           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HG2  | 2        | 0.5           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HG3  | 2        | 0.5           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HG2  | 10       | 0.5           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HG3  | 10       | 0.5           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HG2  | 10       | 0.5           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HG3  | 10       | 0.5           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HG2  | 14       | 0.5           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HG3  | 14       | 0.5           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HG2  | 14       | 0.5           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HG3  | 14       | 0.5           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HG2  | 16       | 0.5           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HG3  | 16       | 0.5           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HG2  | 16       | 0.5           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HG3  | 16       | 0.5           |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HA   | 6        | 0.5           |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HA   | 6        | 0.5           |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:17:LYS:H    | 5        | 0.5           |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:17:LYS:H    | 7        | 0.5           |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HE   | 4        | 0.5           |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HE   | 8        | 0.5           |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HE    | 1        | 0.5           |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:17:LYS:H    | 12       | 0.5           |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:17:LYS:H    | 19       | 0.5           |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H    | 4        | 0.5           |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H    | 4        | 0.5           |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H    | 4        | 0.5           |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H    | 4        | 0.5           |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H    | 4        | 0.5           |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H    | 4        | 0.5           |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H    | 8        | 0.5           |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H    | 8        | 0.5           |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H    | 8        | 0.5           |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H    | 8        | 0.5           |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H    | 8        | 0.5           |
| (1,651) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H    | 8        | 0.5           |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H    | 4        | 0.5           |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H    | 4        | 0.5           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 4        | 0.5           |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H   | 4        | 0.5           |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H   | 4        | 0.5           |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H   | 4        | 0.5           |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:H   | 8        | 0.5           |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:H   | 8        | 0.5           |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 8        | 0.5           |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:H   | 8        | 0.5           |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:H   | 8        | 0.5           |
| (1,649) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:H   | 8        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 1        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 1        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 1        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 1        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 1        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 1        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 1        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 1        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 1        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 1        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 1        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 1        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 2        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 2        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 2        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 2        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 2        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 2        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 2        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 2        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 2        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 2        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 2        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 2        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 3        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 3        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 3        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 3        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 3        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 3        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 3        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 3        | 0.5           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 3        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 3        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 3        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 3        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 5        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 5        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 5        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 5        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 5        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 5        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 5        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 5        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 5        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 5        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 5        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 5        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 6        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 6        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 6        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 6        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 6        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 6        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 6        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 6        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 6        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 6        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 6        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 6        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 7        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 7        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 7        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 7        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 7        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 7        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 7        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 7        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 7        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 7        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 7        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 7        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 9        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 9        | 0.5           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 9        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 9        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 9        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 9        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 9        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 9        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 9        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 9        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 9        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 9        | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 10       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 10       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 10       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 10       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 10       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 10       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 10       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 10       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 10       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 10       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 10       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 10       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 11       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 11       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 11       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 11       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 11       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 11       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 11       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 11       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 11       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 11       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 11       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 11       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 12       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 12       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 12       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 12       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 12       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 12       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 12       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 12       | 0.5           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 12       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 12       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 12       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 12       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 13       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 13       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 13       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 13       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 13       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 13       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 13       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 13       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 13       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 13       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 13       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 13       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 14       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 14       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 14       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 14       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 14       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 14       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 14       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 14       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 14       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 14       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 14       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 14       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 16       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 16       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 16       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 16       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 16       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 16       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 16       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 16       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 16       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 16       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 16       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 16       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 17       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 17       | 0.5           |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 17       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 17       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 17       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 17       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 17       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 17       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 17       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 17       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 17       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 17       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 18       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 18       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 18       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 18       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 18       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 18       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 18       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 18       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 18       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 18       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 18       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 18       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 19       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 19       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 19       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 19       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 19       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 19       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 19       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 19       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 19       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 19       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 19       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 19       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 20       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 20       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 20       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 20       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 20       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 20       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 20       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 20       | 0.5           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 20       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 20       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 20       | 0.5           |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 20       | 0.5           |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG2 | 1        | 0.5           |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG3 | 1        | 0.5           |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG2 | 3        | 0.5           |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG3 | 3        | 0.5           |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG2 | 5        | 0.5           |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG3 | 5        | 0.5           |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG2 | 7        | 0.5           |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG3 | 7        | 0.5           |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG2 | 10       | 0.5           |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG3 | 10       | 0.5           |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG2 | 12       | 0.5           |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG3 | 12       | 0.5           |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG2 | 14       | 0.5           |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG3 | 14       | 0.5           |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG2 | 16       | 0.5           |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG3 | 16       | 0.5           |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG2 | 19       | 0.5           |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG3 | 19       | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG2 | 2        | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG3 | 2        | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG2 | 3        | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG3 | 3        | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG2 | 6        | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG3 | 6        | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG2 | 7        | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG3 | 7        | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG2 | 9        | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG3 | 9        | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG2 | 10       | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG3 | 10       | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG2 | 11       | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG3 | 11       | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG2 | 13       | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG3 | 13       | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG2 | 16       | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG3 | 16       | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG2 | 17       | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HG3 | 17       | 0.5           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HG2 | 18       | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HG3 | 18       | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HG2 | 19       | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HG3 | 19       | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HG2 | 20       | 0.5           |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HG3 | 20       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 1        | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 1        | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 2        | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 2        | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 3        | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 3        | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 6        | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 6        | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 7        | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 7        | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 9        | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 9        | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 10       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 10       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 11       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 11       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 12       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 12       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 13       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 13       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 14       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 14       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 16       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 16       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 17       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 17       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 18       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 18       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 19       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 19       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 20       | 0.5           |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 20       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 1        | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 1        | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 2        | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 2        | 0.5           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 3        | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 3        | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 6        | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 6        | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 7        | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 7        | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 9        | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 9        | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 10       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 10       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 11       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 11       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 12       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 12       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 13       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 13       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 14       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 14       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 16       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 16       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 17       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 17       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 18       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 18       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 19       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 19       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD2 | 20       | 0.5           |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HD3 | 20       | 0.5           |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:6:ALA:HA   | 3        | 0.5           |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:6:ALA:HA   | 3        | 0.5           |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:6:ALA:HA   | 4        | 0.5           |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:6:ALA:HA   | 4        | 0.5           |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:6:ALA:HA   | 8        | 0.5           |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:6:ALA:HA   | 8        | 0.5           |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:6:ALA:HA   | 10       | 0.5           |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:6:ALA:HA   | 10       | 0.5           |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:6:ALA:HA   | 11       | 0.5           |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:6:ALA:HA   | 11       | 0.5           |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:6:ALA:HA   | 15       | 0.5           |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:6:ALA:HA   | 15       | 0.5           |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:6:ALA:HA   | 16       | 0.5           |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:6:ALA:HA   | 16       | 0.5           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|--------------|----------|---------------|
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:6:ALA:HA | 20       | 0.5           |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:6:ALA:HA | 20       | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H | 1        | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H | 1        | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H | 2        | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H | 2        | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H | 3        | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H | 3        | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H | 4        | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H | 4        | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H | 5        | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H | 5        | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H | 6        | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H | 6        | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H | 7        | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H | 7        | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H | 9        | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H | 9        | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H | 10       | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H | 10       | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H | 11       | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H | 11       | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H | 13       | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H | 13       | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H | 14       | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H | 14       | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H | 16       | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H | 16       | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H | 17       | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H | 17       | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H | 18       | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H | 18       | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H | 19       | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H | 19       | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H | 20       | 0.5           |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H | 20       | 0.5           |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HA | 4        | 0.5           |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HA | 6        | 0.5           |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HA | 7        | 0.5           |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HA | 8        | 0.5           |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HA | 10       | 0.5           |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HA | 18       | 0.5           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 4        | 0.5           |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 4        | 0.5           |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE1 | 8        | 0.5           |
| (1,492) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HE2 | 8        | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H   | 1        | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H   | 1        | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H   | 2        | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H   | 2        | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H   | 3        | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H   | 3        | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H   | 5        | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H   | 5        | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H   | 6        | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H   | 6        | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H   | 7        | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H   | 7        | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H   | 9        | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H   | 9        | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H   | 10       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H   | 10       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H   | 11       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H   | 11       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H   | 12       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H   | 12       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H   | 13       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H   | 13       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H   | 14       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H   | 14       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H   | 15       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H   | 15       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H   | 16       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H   | 16       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H   | 17       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H   | 17       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H   | 18       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H   | 18       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H   | 19       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H   | 19       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H   | 20       | 0.5           |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H   | 20       | 0.5           |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 1        | 0.5           |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 1        | 0.5           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 1        | 0.5           |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 1        | 0.5           |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 12       | 0.5           |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 12       | 0.5           |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 12       | 0.5           |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 12       | 0.5           |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H    | 4        | 0.5           |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H    | 4        | 0.5           |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:10:ASP:H    | 8        | 0.5           |
| (1,391) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:10:ASP:H    | 8        | 0.5           |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2  | 4        | 0.5           |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3  | 4        | 0.5           |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2  | 8        | 0.5           |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3  | 8        | 0.5           |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2  | 4        | 0.5           |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3  | 4        | 0.5           |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2  | 8        | 0.5           |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3  | 8        | 0.5           |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.5           |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.5           |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.5           |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.5           |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.5           |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.5           |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.5           |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.5           |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.5           |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.5           |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.5           |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.5           |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.5           |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.5           |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.5           |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.5           |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.5           |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.5           |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.5           |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.5           |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.5           |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.5           |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.5           |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.5           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 1        | 0.5           |
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 2        | 0.5           |
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 3        | 0.5           |
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 5        | 0.5           |
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 6        | 0.5           |
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 7        | 0.5           |
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 9        | 0.5           |
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 10       | 0.5           |
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 11       | 0.5           |
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 12       | 0.5           |
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 13       | 0.5           |
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 14       | 0.5           |
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 15       | 0.5           |
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 16       | 0.5           |
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 17       | 0.5           |
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 18       | 0.5           |
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 19       | 0.5           |
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 20       | 0.5           |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 4        | 0.5           |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 4        | 0.5           |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 8        | 0.5           |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 8        | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD1 | 1        | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD2 | 1        | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD1 | 2        | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD2 | 2        | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD1 | 3        | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD2 | 3        | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD1 | 5        | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD2 | 5        | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD1 | 6        | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD2 | 6        | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD1 | 7        | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD2 | 7        | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD1 | 9        | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD2 | 9        | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD1 | 10       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD2 | 10       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD1 | 11       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD2 | 11       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD1 | 12       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD2 | 12       | 0.5           |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HD1 | 13       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HD2 | 13       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HD1 | 14       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HD2 | 14       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HD1 | 15       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HD2 | 15       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HD1 | 16       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HD2 | 16       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HD1 | 17       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HD2 | 17       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HD1 | 18       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HD2 | 18       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HD1 | 19       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HD2 | 19       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HD1 | 20       | 0.5           |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:8:PHE:HD2 | 20       | 0.5           |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HD1 | 4        | 0.5           |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HD2 | 4        | 0.5           |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HD1 | 8        | 0.5           |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HD2 | 8        | 0.5           |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HD1 | 13       | 0.5           |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HD2 | 13       | 0.5           |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HD1 | 17       | 0.5           |
| (1,221) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HD2 | 17       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 1        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 1        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 1        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 1        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 1        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 1        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 1        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 1        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 1        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 1        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 1        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 1        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 2        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 2        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 2        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 2        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 2        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 2        | 0.5           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 2        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 2        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 2        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 2        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 2        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 2        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 5        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 5        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 5        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 5        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 5        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 5        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 5        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 5        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 5        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 5        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 5        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 5        | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 12       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 12       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 12       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 12       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 12       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 12       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 12       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 12       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 12       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 12       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 12       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 12       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 13       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 13       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 13       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 13       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 13       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 13       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 13       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 13       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 13       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 13       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 13       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 13       | 0.5           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 14       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 14       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 14       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 14       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 14       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 14       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 14       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 14       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 14       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 14       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 14       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 14       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 19       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 19       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 19       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 19       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 19       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 19       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 19       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 19       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 19       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 19       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 19       | 0.5           |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 19       | 0.5           |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:8:PHE:H   | 1        | 0.5           |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:8:PHE:H   | 4        | 0.5           |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:8:PHE:H   | 6        | 0.5           |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:8:PHE:H   | 7        | 0.5           |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:8:PHE:H   | 8        | 0.5           |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:8:PHE:H   | 9        | 0.5           |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:8:PHE:H   | 11       | 0.5           |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:8:PHE:H   | 15       | 0.5           |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:8:PHE:H   | 16       | 0.5           |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:8:PHE:H   | 17       | 0.5           |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:8:PHE:H   | 20       | 0.5           |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:6:ALA:H   | 9        | 0.5           |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:6:ALA:H   | 9        | 0.5           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:6:ALA:HB1 | 14       | 0.5           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:6:ALA:HB2 | 14       | 0.5           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:6:ALA:HB3 | 14       | 0.5           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3  | 1:A:6:ALA:HB1 | 14       | 0.5           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3  | 1:A:6:ALA:HB2 | 14       | 0.5           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3   | 1:A:6:ALA:HB3   | 14       | 0.5           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2  | 15       | 0.49          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3  | 15       | 0.49          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2  | 15       | 0.49          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3  | 15       | 0.49          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2  | 15       | 0.49          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3  | 15       | 0.49          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2  | 15       | 0.49          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3  | 15       | 0.49          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2  | 15       | 0.49          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3  | 15       | 0.49          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2  | 15       | 0.49          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3  | 15       | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HD11 | 4        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HD12 | 4        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HD13 | 4        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HD11 | 4        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HD12 | 4        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HD13 | 4        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HD11 | 8        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HD12 | 8        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HD13 | 8        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB2   | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HD11 | 8        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HD12 | 8        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HD13 | 8        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.49          |
| (2,2)   | 1:A:7:PHE:HB3   | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.49          |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H    | 1:A:17:LYS:H    | 5        | 0.49          |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H    | 1:A:17:LYS:H    | 6        | 0.49          |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H    | 1:A:17:LYS:H    | 7        | 0.49          |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H    | 1:A:17:LYS:H    | 19       | 0.49          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2  | 1:A:17:LYS:H    | 11       | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:H    | 11       | 0.49          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG2  | 6        | 0.49          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG3  | 6        | 0.49          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG2  | 6        | 0.49          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG3  | 6        | 0.49          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG2  | 20       | 0.49          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG3  | 20       | 0.49          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG2  | 20       | 0.49          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG3  | 20       | 0.49          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HA   | 20       | 0.49          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HA   | 20       | 0.49          |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:17:LYS:H    | 6        | 0.49          |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:17:LYS:H    | 20       | 0.49          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG2  | 4        | 0.49          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG3  | 4        | 0.49          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG2  | 8        | 0.49          |
| (1,706) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HG3  | 8        | 0.49          |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HE    | 17       | 0.49          |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:17:LYS:H    | 1        | 0.49          |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:17:LYS:H    | 5        | 0.49          |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:17:LYS:H    | 7        | 0.49          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE2  | 2        | 0.49          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE3  | 2        | 0.49          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE2  | 5        | 0.49          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE3  | 5        | 0.49          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H    | 1        | 0.49          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H    | 1        | 0.49          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H    | 5        | 0.49          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H    | 5        | 0.49          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H    | 7        | 0.49          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H    | 7        | 0.49          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H    | 19       | 0.49          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H    | 19       | 0.49          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HD2   | 11       | 0.49          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HD3   | 11       | 0.49          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HD2   | 15       | 0.49          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HD3   | 15       | 0.49          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HD2   | 20       | 0.49          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HD3   | 20       | 0.49          |
| (1,654) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 15       | 0.49          |
| (1,654) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 15       | 0.49          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:14:GLN:HG2  | 2        | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG3 | 2        | 0.49          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG2 | 6        | 0.49          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG3 | 6        | 0.49          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG2 | 9        | 0.49          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG3 | 9        | 0.49          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG2 | 13       | 0.49          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG3 | 13       | 0.49          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG2 | 17       | 0.49          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG3 | 17       | 0.49          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG2 | 18       | 0.49          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG3 | 18       | 0.49          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG2 | 20       | 0.49          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG3 | 20       | 0.49          |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H   | 4        | 0.49          |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H   | 4        | 0.49          |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H   | 4        | 0.49          |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H   | 8        | 0.49          |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H   | 8        | 0.49          |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H   | 8        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 1        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 1        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 1        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 1        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 1        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 1        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 2        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 2        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 2        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 2        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 2        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 2        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 3        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 3        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 3        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 3        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 3        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 3        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 5        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 5        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 5        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 5        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 5        | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 5        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 6        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 6        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 6        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 6        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 6        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 6        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 7        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 7        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 7        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 7        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 7        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 7        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 9        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 9        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 9        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 9        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 9        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 9        | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 10       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 10       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 10       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 10       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 10       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 10       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 11       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 11       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 11       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 11       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 11       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 11       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 12       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 12       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 12       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 12       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 12       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 12       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 13       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 13       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 13       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 13       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 13       | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3  | 13       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2  | 14       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3  | 14       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2  | 14       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3  | 14       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2  | 14       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3  | 14       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2  | 16       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3  | 16       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2  | 16       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3  | 16       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2  | 16       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3  | 16       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2  | 17       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3  | 17       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2  | 17       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3  | 17       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2  | 17       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3  | 17       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2  | 18       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3  | 18       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2  | 18       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3  | 18       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2  | 18       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3  | 18       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2  | 19       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3  | 19       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2  | 19       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3  | 19       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2  | 19       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3  | 19       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2  | 20       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3  | 20       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2  | 20       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3  | 20       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2  | 20       | 0.49          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3  | 20       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.49          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.49          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.49          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.49          |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HG2  | 1        | 0.49          |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HG3  | 1        | 0.49          |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HG2  | 5        | 0.49          |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HG3  | 5        | 0.49          |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HG2  | 12       | 0.49          |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HG3  | 12       | 0.49          |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HG2  | 14       | 0.49          |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HG3  | 14       | 0.49          |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HD2  | 5        | 0.49          |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HD3  | 5        | 0.49          |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HD2  | 15       | 0.49          |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HD3  | 15       | 0.49          |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HD2  | 5        | 0.49          |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HD3  | 5        | 0.49          |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HD2  | 15       | 0.49          |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HD3  | 15       | 0.49          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.49          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.49          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.49          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.49          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:6:ALA:HA    | 12       | 0.49          |
| (1,55)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:6:ALA:HA    | 12       | 0.49          |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H    | 8        | 0.49          |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H    | 8        | 0.49          |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:H    | 12       | 0.49          |
| (1,546) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:H    | 12       | 0.49          |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HA    | 1        | 0.49          |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HA    | 3        | 0.49          |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HA    | 11       | 0.49          |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HA    | 12       | 0.49          |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HA    | 15       | 0.49          |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HA    | 16       | 0.49          |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HA    | 20       | 0.49          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:H    | 11       | 0.49          |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:H    | 15       | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:13:LEU:H   | 11       | 0.49          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:H   | 11       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 2        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 2        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 2        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 2        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 3        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 3        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 3        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 3        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 4        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 4        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 4        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 4        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 5        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 5        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 5        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 5        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 6        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 6        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 6        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 6        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 7        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 7        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 7        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 7        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 8        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 8        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 8        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 8        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 9        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 9        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 9        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 9        | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 10       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 10       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 10       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 10       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 11       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 11       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 11       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 11       | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 13       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 13       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 13       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 13       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 14       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 14       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 14       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 14       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 16       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 16       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 17       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 17       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 17       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 17       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 19       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 19       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 19       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 19       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.49          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 1        | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 1        | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 2        | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 2        | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 3        | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 3        | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 5        | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 5        | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 6        | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 6        | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 7        | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 7        | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 9        | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 9        | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 10       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 10       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 11       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 11       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 12       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 12       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 13       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 13       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 14       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 14       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 15       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 15       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 16       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 16       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 17       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 17       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 18       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 18       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 19       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 19       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 20       | 0.49          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 20       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 1        | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 1        | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 2        | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 2        | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 3        | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 3        | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 5        | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 5        | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 6        | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 6        | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 7        | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 7        | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 9        | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 9        | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 10       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 10       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 11       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 11       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H | 12       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H | 12       | 0.49          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H    | 13       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H    | 13       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H    | 14       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H    | 14       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H    | 15       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H    | 15       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H    | 16       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H    | 16       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H    | 17       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H    | 17       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H    | 18       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H    | 18       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H    | 19       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H    | 19       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H    | 20       | 0.49          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H    | 20       | 0.49          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H     | 9        | 0.49          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H     | 9        | 0.49          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2  | 4        | 0.49          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3  | 4        | 0.49          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 4        | 0.49          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 4        | 0.49          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2  | 8        | 0.49          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3  | 8        | 0.49          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 8        | 0.49          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 8        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.49          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.49          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.49          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.49          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 15       | 0.49          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 15       | 0.49          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 15       | 0.49          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 15       | 0.49          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 15       | 0.49          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 15       | 0.49          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H     | 9        | 0.49          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H     | 9        | 0.49          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 4        | 0.49          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 4        | 0.49          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 4        | 0.49          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 4        | 0.49          |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA    | 1        | 0.49          |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA    | 2        | 0.49          |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA    | 3        | 0.49          |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA    | 5        | 0.49          |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA    | 6        | 0.49          |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA    | 7        | 0.49          |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA    | 9        | 0.49          |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA    | 10       | 0.49          |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA    | 11       | 0.49          |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA    | 12       | 0.49          |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA    | 13       | 0.49          |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA    | 14       | 0.49          |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA    | 16       | 0.49          |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA    | 17       | 0.49          |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA    | 18       | 0.49          |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA    | 19       | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA  | 20       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 1        | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 1        | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 2        | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 2        | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 3        | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 3        | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 5        | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 5        | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 6        | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 6        | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 7        | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 7        | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 10       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 10       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 11       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 11       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 12       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 12       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 13       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 13       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 14       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 14       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 15       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 15       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 16       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 16       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 17       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 17       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 18       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 18       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 20       | 0.49          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 20       | 0.49          |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD1 | 4        | 0.49          |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD2 | 4        | 0.49          |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD1 | 8        | 0.49          |
| (1,285) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HD2 | 8        | 0.49          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 4        | 0.49          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 8        | 0.49          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 9        | 0.49          |
| (1,233) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:7:PHE:HZ  | 4        | 0.49          |
| (1,233) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:7:PHE:HZ  | 8        | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,233) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:7:PHE:HZ  | 9        | 0.49          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 9        | 0.49          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 9        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 3        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 3        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 3        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 3        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 3        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 3        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 3        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 3        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 3        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 3        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 3        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 3        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 4        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 4        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 4        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 4        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 4        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 4        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 4        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 4        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 4        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 4        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 4        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 4        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 6        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 6        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 6        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 6        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 6        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 6        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 6        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 6        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 6        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 6        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 6        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 6        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 7        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 7        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 7        | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 7        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 7        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 7        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 7        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 7        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 7        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 7        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 7        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 7        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 8        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 8        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 8        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 8        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 8        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 8        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 8        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 8        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 8        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 8        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 8        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 8        | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 10       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 10       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 10       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 10       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 10       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 10       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 10       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 10       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 10       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 10       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 10       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 10       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 11       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 11       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 11       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 11       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 11       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 11       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 11       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 11       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 11       | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 11       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 11       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 11       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 15       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 15       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 15       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 15       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 15       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 15       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 15       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 15       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 15       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 15       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 15       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 15       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 16       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 16       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 16       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 16       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 16       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 16       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 16       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 16       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 16       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 16       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 16       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 16       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 17       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 17       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 17       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 17       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 17       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 17       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 17       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 17       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 17       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 17       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 17       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 17       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 18       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 18       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 18       | 0.49          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 18       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 18       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 18       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 18       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 18       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 18       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 18       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 18       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 18       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 20       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 20       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 20       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 20       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 20       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 20       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 20       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 20       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 20       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 20       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 20       | 0.49          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 20       | 0.49          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HA  | 9        | 0.49          |
| (1,170) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HA  | 9        | 0.49          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:3:ARG:HA  | 2        | 0.49          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:3:ARG:HA  | 2        | 0.49          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:3:ARG:HA  | 5        | 0.49          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:3:ARG:HA  | 5        | 0.49          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:3:ARG:HA  | 13       | 0.49          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:3:ARG:HA  | 13       | 0.49          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:3:ARG:HA  | 14       | 0.49          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:3:ARG:HA  | 14       | 0.49          |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:8:PHE:H   | 2        | 0.49          |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:8:PHE:H   | 5        | 0.49          |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:8:PHE:H   | 12       | 0.49          |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:8:PHE:H   | 13       | 0.49          |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:8:PHE:H   | 19       | 0.49          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:6:ALA:H   | 7        | 0.49          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:6:ALA:H   | 7        | 0.49          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:HB2 | 5        | 0.49          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:HB3 | 5        | 0.49          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:HB2 | 5        | 0.49          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:HB3 | 5        | 0.49          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB2  | 5        | 0.49          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB3  | 5        | 0.49          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB2  | 5        | 0.49          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB3  | 5        | 0.49          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2 | 4        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3 | 4        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2 | 4        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3 | 4        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2 | 4        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3 | 4        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2 | 4        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3 | 4        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2 | 4        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3 | 4        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2 | 4        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3 | 4        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2 | 8        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3 | 8        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2 | 8        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3 | 8        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2 | 8        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3 | 8        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2 | 8        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3 | 8        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2 | 8        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3 | 8        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2 | 8        | 0.48          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3 | 8        | 0.48          |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H    | 1:A:17:LYS:H   | 2        | 0.48          |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H    | 1:A:17:LYS:H   | 3        | 0.48          |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H    | 1:A:17:LYS:H   | 10       | 0.48          |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H    | 1:A:17:LYS:H   | 13       | 0.48          |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H    | 1:A:17:LYS:H   | 14       | 0.48          |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H    | 1:A:17:LYS:H   | 16       | 0.48          |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H    | 1:A:17:LYS:H   | 17       | 0.48          |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H    | 1:A:17:LYS:H   | 18       | 0.48          |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H    | 1:A:17:LYS:H   | 20       | 0.48          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2  | 1:A:17:LYS:H   | 1        | 0.48          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3  | 1:A:17:LYS:H   | 1        | 0.48          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2  | 1:A:17:LYS:H   | 5        | 0.48          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3  | 1:A:17:LYS:H   | 5        | 0.48          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2  | 1:A:17:LYS:H   | 12       | 0.48          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:H   | 12       | 0.48          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:H   | 15       | 0.48          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:H   | 15       | 0.48          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:H   | 19       | 0.48          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:H   | 19       | 0.48          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HA  | 2        | 0.48          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HA  | 2        | 0.48          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HA  | 3        | 0.48          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HA  | 3        | 0.48          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HA  | 4        | 0.48          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HA  | 4        | 0.48          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HA  | 8        | 0.48          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HA  | 8        | 0.48          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HA  | 9        | 0.48          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HA  | 9        | 0.48          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HA  | 10       | 0.48          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HA  | 10       | 0.48          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HA  | 13       | 0.48          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HA  | 13       | 0.48          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HA  | 16       | 0.48          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HA  | 16       | 0.48          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HA  | 18       | 0.48          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HA  | 18       | 0.48          |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:17:LYS:H   | 2        | 0.48          |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:17:LYS:H   | 3        | 0.48          |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:17:LYS:H   | 10       | 0.48          |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:17:LYS:H   | 14       | 0.48          |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:17:LYS:H   | 16       | 0.48          |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:17:LYS:H   | 17       | 0.48          |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:17:LYS:H   | 18       | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE2 | 1        | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE3 | 1        | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE2 | 3        | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE3 | 3        | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE2 | 6        | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE3 | 6        | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE2 | 7        | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE3 | 7        | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE2 | 9        | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE3 | 9        | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE2 | 10       | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE3 | 10       | 0.48          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE2 | 13       | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE3 | 13       | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE2 | 14       | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE3 | 14       | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE2 | 16       | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE3 | 16       | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE2 | 17       | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE3 | 17       | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE2 | 18       | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE3 | 18       | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE2 | 19       | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE3 | 19       | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE2 | 20       | 0.48          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H   | 1:A:16:LYS:HE3 | 20       | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 2        | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 2        | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 3        | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 3        | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 6        | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 6        | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 9        | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 9        | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 10       | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 10       | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 12       | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 12       | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 13       | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 13       | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 14       | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 14       | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 16       | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 16       | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 17       | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 17       | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 18       | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 18       | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.48          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.48          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HD2  | 3        | 0.48          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HD3  | 3        | 0.48          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:7:PHE:HE1  | 2        | 0.48          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:7:PHE:HE2  | 2        | 0.48          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1   | 2        | 0.48          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2   | 2        | 0.48          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1   | 5        | 0.48          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2   | 5        | 0.48          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1   | 5        | 0.48          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2   | 5        | 0.48          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1   | 13       | 0.48          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2   | 13       | 0.48          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1   | 13       | 0.48          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2   | 13       | 0.48          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1   | 14       | 0.48          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2   | 14       | 0.48          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1   | 14       | 0.48          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2   | 14       | 0.48          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HA   | 4        | 0.48          |
| (1,586) | 1:A:12:ILE:HB | 1:A:13:LEU:HA   | 8        | 0.48          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.48          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.48          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.48          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.48          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.48          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.48          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.48          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.48          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.48          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.48          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.48          |
| (1,584) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.48          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.48          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.48          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.48          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.48          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.48          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.48          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.48          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.48          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.48          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.48          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.48          |
| (1,583) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.48          |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HG2  | 4        | 0.48          |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HG3  | 4        | 0.48          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HG2 | 8        | 0.48          |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HG3 | 8        | 0.48          |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HG2 | 15       | 0.48          |
| (1,560) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:15:ARG:HG3 | 15       | 0.48          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:14:GLN:H   | 1        | 0.48          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:14:GLN:H   | 2        | 0.48          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:14:GLN:H   | 3        | 0.48          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:14:GLN:H   | 5        | 0.48          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:14:GLN:H   | 6        | 0.48          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:14:GLN:H   | 7        | 0.48          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:14:GLN:H   | 9        | 0.48          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:14:GLN:H   | 10       | 0.48          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:14:GLN:H   | 12       | 0.48          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:14:GLN:H   | 13       | 0.48          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:14:GLN:H   | 14       | 0.48          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:14:GLN:H   | 16       | 0.48          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:14:GLN:H   | 17       | 0.48          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:14:GLN:H   | 18       | 0.48          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:14:GLN:H   | 19       | 0.48          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:14:GLN:H   | 20       | 0.48          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HG  | 15       | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:13:LEU:H   | 1        | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:H   | 1        | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:13:LEU:H   | 2        | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:H   | 2        | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:13:LEU:H   | 3        | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:H   | 3        | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:13:LEU:H   | 5        | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:H   | 5        | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:13:LEU:H   | 6        | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:H   | 6        | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:13:LEU:H   | 7        | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:H   | 7        | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:13:LEU:H   | 9        | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:H   | 9        | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:13:LEU:H   | 10       | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:H   | 10       | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:13:LEU:H   | 12       | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:H   | 12       | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:13:LEU:H   | 13       | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:H   | 13       | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:13:LEU:H   | 14       | 0.48          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:H    | 14       | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:13:LEU:H    | 16       | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:H    | 16       | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:13:LEU:H    | 17       | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:H    | 17       | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:13:LEU:H    | 18       | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:H    | 18       | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:13:LEU:H    | 19       | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:H    | 19       | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:13:LEU:H    | 20       | 0.48          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:13:LEU:H    | 20       | 0.48          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H   | 1:A:12:ILE:H    | 4        | 0.48          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H   | 1:A:12:ILE:H    | 8        | 0.48          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 15       | 0.48          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 15       | 0.48          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 15       | 0.48          |
| (1,398) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 15       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 1        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 1        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 1        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 1        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 1        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 1        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 2        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 2        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 2        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 2        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 2        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 2        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 3        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 3        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 3        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 3        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 3        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 3        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 5        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 5        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 5        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 5        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 5        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 5        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 6        | 0.48          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 6        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 6        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 6        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 6        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 6        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 7        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 7        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 7        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 7        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 7        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 7        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 9        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 9        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 9        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 9        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 9        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 9        | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 10       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 10       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 10       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 10       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 10       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 10       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 11       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 11       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 11       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 11       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 11       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 11       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 12       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 12       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 12       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 12       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 12       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 12       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 13       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 13       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 13       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 13       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 13       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 13       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 14       | 0.48          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 14       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 14       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 14       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 14       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 14       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 16       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 16       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 16       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 16       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 16       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 16       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 17       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 17       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 17       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 17       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 17       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 17       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 18       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 18       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 18       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 18       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 18       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 18       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 19       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 19       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 19       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 19       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 19       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 19       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 20       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 20       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 20       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 20       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 20       | 0.48          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 20       | 0.48          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 15       | 0.48          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 15       | 0.48          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 15       | 0.48          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 19       | 0.48          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 19       | 0.48          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 19       | 0.48          |
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 4        | 0.48          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,340) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA  | 8        | 0.48          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 8        | 0.48          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 8        | 0.48          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 8        | 0.48          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 8        | 0.48          |
| (1,314) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HA   | 15       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 1        | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 1        | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 2        | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 2        | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 3        | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 3        | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 4        | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 4        | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 5        | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 5        | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 6        | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 6        | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 7        | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 7        | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 8        | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 8        | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 9        | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 9        | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 10       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 10       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 11       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 11       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 12       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 12       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 13       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 13       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 14       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 14       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 15       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 15       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 16       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 16       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 17       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 17       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 18       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 18       | 0.48          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ  | 19       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ  | 19       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ  | 20       | 0.48          |
| (1,290) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ  | 20       | 0.48          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 9        | 0.48          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 9        | 0.48          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HA  | 19       | 0.48          |
| (1,287) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HA  | 19       | 0.48          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HD1 | 2        | 0.48          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HD2 | 2        | 0.48          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HD1 | 4        | 0.48          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HD2 | 4        | 0.48          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HD1 | 5        | 0.48          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HD2 | 5        | 0.48          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HD1 | 8        | 0.48          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HD2 | 8        | 0.48          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HD1 | 13       | 0.48          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HD2 | 13       | 0.48          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HD1 | 14       | 0.48          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HD2 | 14       | 0.48          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HD1 | 19       | 0.48          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HD2 | 19       | 0.48          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 1        | 0.48          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 2        | 0.48          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 3        | 0.48          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 5        | 0.48          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 6        | 0.48          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 7        | 0.48          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 10       | 0.48          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 11       | 0.48          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 12       | 0.48          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 13       | 0.48          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 14       | 0.48          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 15       | 0.48          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 16       | 0.48          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 17       | 0.48          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 18       | 0.48          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 19       | 0.48          |
| (1,239) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 20       | 0.48          |
| (1,233) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:7:PHE:HZ  | 1        | 0.48          |
| (1,233) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:7:PHE:HZ  | 2        | 0.48          |
| (1,233) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:7:PHE:HZ  | 5        | 0.48          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,233) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:7:PHE:HZ  | 6        | 0.48          |
| (1,233) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:7:PHE:HZ  | 10       | 0.48          |
| (1,233) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:7:PHE:HZ  | 12       | 0.48          |
| (1,233) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:7:PHE:HZ  | 13       | 0.48          |
| (1,233) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:7:PHE:HZ  | 14       | 0.48          |
| (1,233) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:7:PHE:HZ  | 16       | 0.48          |
| (1,233) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:7:PHE:HZ  | 17       | 0.48          |
| (1,233) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:7:PHE:HZ  | 18       | 0.48          |
| (1,233) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:7:PHE:HZ  | 19       | 0.48          |
| (1,233) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:7:PHE:HZ  | 20       | 0.48          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:7:PHE:HB2 | 9        | 0.48          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:7:PHE:HB3 | 9        | 0.48          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 4        | 0.48          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 4        | 0.48          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 8        | 0.48          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 8        | 0.48          |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:4:LEU:HG  | 13       | 0.48          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 9        | 0.48          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 9        | 0.48          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 9        | 0.48          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 9        | 0.48          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 9        | 0.48          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 9        | 0.48          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 9        | 0.48          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 9        | 0.48          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 9        | 0.48          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 9        | 0.48          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 9        | 0.48          |
| (1,173) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 9        | 0.48          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 4        | 0.48          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 4        | 0.48          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 8        | 0.48          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 8        | 0.48          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 14       | 0.48          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 14       | 0.48          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 4        | 0.48          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 4        | 0.48          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 8        | 0.48          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 8        | 0.48          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 14       | 0.48          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 14       | 0.48          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:3:ARG:HA  | 17       | 0.48          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:3:ARG:HA  | 17       | 0.48          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:3:ARG:HA  | 19       | 0.48          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:3:ARG:HA  | 19       | 0.48          |
| (1,122) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:8:PHE:H   | 14       | 0.48          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 5        | 0.48          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 5        | 0.48          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 5        | 0.48          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 5        | 0.48          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 5        | 0.48          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 5        | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:6:ALA:H   | 1        | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:6:ALA:H   | 1        | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:6:ALA:H   | 2        | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:6:ALA:H   | 2        | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:6:ALA:H   | 4        | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:6:ALA:H   | 4        | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:6:ALA:H   | 6        | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:6:ALA:H   | 6        | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:6:ALA:H   | 8        | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:6:ALA:H   | 8        | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:6:ALA:H   | 10       | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:6:ALA:H   | 10       | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:6:ALA:H   | 12       | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:6:ALA:H   | 12       | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:6:ALA:H   | 13       | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:6:ALA:H   | 13       | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:6:ALA:H   | 16       | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:6:ALA:H   | 16       | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:6:ALA:H   | 18       | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:6:ALA:H   | 18       | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:6:ALA:H   | 19       | 0.48          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:6:ALA:H   | 19       | 0.48          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 11       | 0.48          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 11       | 0.48          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 11       | 0.48          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 11       | 0.48          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 14       | 0.48          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 14       | 0.48          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 14       | 0.48          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 14       | 0.48          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 15       | 0.48          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 15       | 0.48          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:HB2 | 15       | 0.48          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:HB3 | 15       | 0.48          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:HB2 | 11       | 0.48          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:HB3 | 11       | 0.48          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:HB2 | 11       | 0.48          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:HB3 | 11       | 0.48          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:HB2 | 14       | 0.48          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:HB3 | 14       | 0.48          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:HB2 | 14       | 0.48          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:HB3 | 14       | 0.48          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:HB2 | 15       | 0.48          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:HB3 | 15       | 0.48          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:HB2 | 15       | 0.48          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:HB3 | 15       | 0.48          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O    | 1:A:12:ILE:N  | 4        | 0.47          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O    | 1:A:12:ILE:N  | 8        | 0.47          |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H   | 1:A:17:LYS:H  | 9        | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:H  | 2        | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:H  | 2        | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:H  | 3        | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:H  | 3        | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:H  | 4        | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:H  | 4        | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:H  | 6        | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:H  | 6        | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:H  | 7        | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:H  | 7        | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:H  | 8        | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:H  | 8        | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:H  | 9        | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:H  | 9        | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:H  | 10       | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:H  | 10       | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:H  | 13       | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:H  | 13       | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:H  | 14       | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:H  | 14       | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:H  | 16       | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:H  | 16       | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:H  | 17       | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:H  | 17       | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:H  | 18       | 0.47          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3  | 1:A:17:LYS:H   | 18       | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG2  | 1:A:17:LYS:H   | 20       | 0.47          |
| (1,741) | 1:A:16:LYS:HG3  | 1:A:17:LYS:H   | 20       | 0.47          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HA  | 14       | 0.47          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HA  | 14       | 0.47          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HA  | 17       | 0.47          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HA  | 17       | 0.47          |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:17:LYS:H   | 9        | 0.47          |
| (1,719) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:17:LYS:H   | 13       | 0.47          |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HE  | 15       | 0.47          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD2 | 11       | 0.47          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD3 | 11       | 0.47          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD2 | 15       | 0.47          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD3 | 15       | 0.47          |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:17:LYS:H   | 6        | 0.47          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H    | 1:A:16:LYS:HE2 | 12       | 0.47          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H    | 1:A:16:LYS:HE3 | 12       | 0.47          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H    | 1:A:16:LYS:HE2 | 15       | 0.47          |
| (1,675) | 1:A:14:GLN:H    | 1:A:16:LYS:HE3 | 15       | 0.47          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:7:PHE:HE1  | 17       | 0.47          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:7:PHE:HE2  | 17       | 0.47          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:7:PHE:HE1  | 17       | 0.47          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:7:PHE:HE2  | 17       | 0.47          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:7:PHE:HE1  | 19       | 0.47          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:7:PHE:HE2  | 19       | 0.47          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:7:PHE:HE1  | 19       | 0.47          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:7:PHE:HE2  | 19       | 0.47          |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:13:LEU:H   | 12       | 0.47          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 4        | 0.47          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 4        | 0.47          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 4        | 0.47          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 4        | 0.47          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 4        | 0.47          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 4        | 0.47          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 8        | 0.47          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 8        | 0.47          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 8        | 0.47          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 8        | 0.47          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 8        | 0.47          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 8        | 0.47          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 15       | 0.47          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 15       | 0.47          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 15       | 0.47          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 15       | 0.47          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 15       | 0.47          |
| (1,591) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 15       | 0.47          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB2 | 12       | 0.47          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB3 | 12       | 0.47          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB2 | 12       | 0.47          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB3 | 12       | 0.47          |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HD2 | 8        | 0.47          |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HD3 | 8        | 0.47          |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HD2 | 8        | 0.47          |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:15:ARG:HD3 | 8        | 0.47          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.47          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:10:ASP:HB2 | 4        | 0.47          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:10:ASP:HB3 | 4        | 0.47          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:10:ASP:HB2 | 8        | 0.47          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:10:ASP:HB3 | 8        | 0.47          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:10:ASP:HB2 | 4        | 0.47          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:10:ASP:HB3 | 4        | 0.47          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:10:ASP:HB2 | 8        | 0.47          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:10:ASP:HB3 | 8        | 0.47          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H     | 1:A:12:ILE:H   | 1        | 0.47          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H     | 1:A:12:ILE:H   | 2        | 0.47          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H     | 1:A:12:ILE:H   | 3        | 0.47          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H     | 1:A:12:ILE:H   | 5        | 0.47          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H     | 1:A:12:ILE:H   | 6        | 0.47          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H     | 1:A:12:ILE:H   | 7        | 0.47          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H     | 1:A:12:ILE:H   | 9        | 0.47          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H     | 1:A:12:ILE:H   | 10       | 0.47          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H     | 1:A:12:ILE:H   | 11       | 0.47          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H     | 1:A:12:ILE:H   | 12       | 0.47          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H     | 1:A:12:ILE:H   | 13       | 0.47          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H     | 1:A:12:ILE:H   | 14       | 0.47          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H     | 1:A:12:ILE:H   | 16       | 0.47          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H     | 1:A:12:ILE:H   | 17       | 0.47          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H     | 1:A:12:ILE:H   | 18       | 0.47          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H     | 1:A:12:ILE:H   | 19       | 0.47          |
| (1,411) | 1:A:8:PHE:H     | 1:A:12:ILE:H   | 20       | 0.47          |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA    | 1:A:11:PHE:HA  | 4        | 0.47          |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA    | 1:A:11:PHE:HA  | 8        | 0.47          |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA    | 1:A:11:PHE:HA  | 15       | 0.47          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2   | 1:A:4:LEU:H    | 4        | 0.47          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H     | 4        | 0.47          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H     | 8        | 0.47          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H     | 8        | 0.47          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H     | 10       | 0.47          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H     | 10       | 0.47          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H     | 12       | 0.47          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H     | 12       | 0.47          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H     | 20       | 0.47          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H     | 20       | 0.47          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.47          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.47          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.47          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.47          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.47          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.47          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.47          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.47          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.47          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.47          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.47          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 3        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 3        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 3        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 3        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 3        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 3        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 3        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 3        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 3        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 3        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 3        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 3        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 4        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 4        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 4        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 4        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 4        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 4        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 4        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 4        | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 4        | 0.47          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 4        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 4        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 4        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 6        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 6        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 6        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 6        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 6        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 6        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 6        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 6        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 6        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 6        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 6        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 6        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 7        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 7        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 7        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 7        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 7        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 7        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 7        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 7        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 7        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 7        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 7        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 7        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 8        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 8        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 8        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 8        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 8        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 8        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 8        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 8        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 8        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 8        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 8        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 8        | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 10       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 10       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 10       | 0.47          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 10       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 10       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 10       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 10       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 10       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 10       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 10       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 10       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 10       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 11       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 11       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 11       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 11       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 11       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 11       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 11       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 11       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 11       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 11       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 11       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 11       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 12       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 12       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 12       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 12       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 12       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 12       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 12       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 12       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 12       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 12       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 12       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 12       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 15       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 15       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 15       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 15       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 15       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 15       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 15       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 15       | 0.47          |
| (1,35) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 15       | 0.47          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 15       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 15       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 15       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 16       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 16       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 16       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 16       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 16       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 16       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 16       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 16       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 16       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 16       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 16       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 16       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 20       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 20       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 20       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 20       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 20       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 20       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 20       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 20       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 20       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 20       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 20       | 0.47          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 20       | 0.47          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 4        | 0.47          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 4        | 0.47          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 4        | 0.47          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 4        | 0.47          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 4        | 0.47          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 4        | 0.47          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 8        | 0.47          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 8        | 0.47          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 8        | 0.47          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 8        | 0.47          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 8        | 0.47          |
| (1,343) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 8        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1        | 0.47          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 2        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 2        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 2        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 3        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 3        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 3        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 5        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 5        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 5        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 6        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 6        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 6        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 7        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 7        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 7        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 9        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 9        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 9        | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 10       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 10       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 10       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 11       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 11       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 11       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 12       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 12       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 12       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 13       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 13       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 13       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 14       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 14       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 14       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 16       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 16       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 16       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 17       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 17       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 17       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 18       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 18       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 18       | 0.47          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 20       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 20       | 0.47          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 20       | 0.47          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H     | 4        | 0.47          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H     | 4        | 0.47          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H     | 8        | 0.47          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H     | 8        | 0.47          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H     | 10       | 0.47          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H     | 10       | 0.47          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H     | 12       | 0.47          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H     | 12       | 0.47          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H     | 20       | 0.47          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H     | 20       | 0.47          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H    | 4        | 0.47          |
| (1,339) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H    | 8        | 0.47          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 9        | 0.47          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 9        | 0.47          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 9        | 0.47          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 9        | 0.47          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 9        | 0.47          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 9        | 0.47          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 9        | 0.47          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 9        | 0.47          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 9        | 0.47          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 9        | 0.47          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 9        | 0.47          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 9        | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ    | 1        | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ    | 1        | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ    | 2        | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ    | 2        | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ    | 3        | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ    | 3        | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ    | 5        | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ    | 5        | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ    | 6        | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ    | 6        | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ    | 7        | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ    | 7        | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ    | 9        | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ    | 9        | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ    | 11       | 0.47          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 11       | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 12       | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 12       | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 13       | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 13       | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 14       | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 14       | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 16       | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 16       | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 17       | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 17       | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 19       | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 19       | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 20       | 0.47          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 20       | 0.47          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 9        | 0.47          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 9        | 0.47          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 9        | 0.47          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 9        | 0.47          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 9        | 0.47          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 9        | 0.47          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 9        | 0.47          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 9        | 0.47          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 9        | 0.47          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 9        | 0.47          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 9        | 0.47          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 9        | 0.47          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 8        | 0.47          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 8        | 0.47          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 9        | 0.47          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 9        | 0.47          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 9        | 0.47          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 9        | 0.47          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 9        | 0.47          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 9        | 0.47          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 9        | 0.47          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 9        | 0.47          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 9        | 0.47          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 9        | 0.47          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 9        | 0.47          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 9        | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HD1  | 1        | 0.47          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD2 | 1        | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD1 | 3        | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD2 | 3        | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD1 | 6        | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD2 | 6        | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD1 | 7        | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD2 | 7        | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD1 | 9        | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD2 | 9        | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD1 | 10       | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD2 | 10       | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD1 | 11       | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD2 | 11       | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD1 | 12       | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD2 | 12       | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD1 | 15       | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD2 | 15       | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD1 | 16       | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD2 | 16       | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD1 | 17       | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD2 | 17       | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD1 | 18       | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD2 | 18       | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD1 | 20       | 0.47          |
| (1,259) | 1:A:6:ALA:H  | 1:A:8:PHE:HD2 | 20       | 0.47          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 2        | 0.47          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 2        | 0.47          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.47          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.47          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.47          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.47          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.47          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.47          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.47          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.47          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 2        | 0.47          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 2        | 0.47          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.47          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.47          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.47          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.47          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.47          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.47          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.47          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.47          |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA | 1:A:8:PHE:HZ  | 2        | 0.47          |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA | 1:A:8:PHE:HZ  | 13       | 0.47          |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA | 1:A:8:PHE:HZ  | 14       | 0.47          |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA | 1:A:8:PHE:HZ  | 19       | 0.47          |
| (1,233) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HZ  | 3        | 0.47          |
| (1,233) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HZ  | 7        | 0.47          |
| (1,233) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HZ  | 11       | 0.47          |
| (1,233) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HZ  | 15       | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1        | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1        | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 2        | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 2        | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 5        | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 5        | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 6        | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 6        | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 9        | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 9        | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 10       | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 10       | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 13       | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 13       | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 14       | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 14       | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 16       | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 16       | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 17       | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 17       | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 19       | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 19       | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 20       | 0.47          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 20       | 0.47          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB2 | 2        | 0.47          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB3 | 2        | 0.47          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB2 | 13       | 0.47          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB3 | 13       | 0.47          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB2 | 14       | 0.47          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB3 | 14       | 0.47          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB2 | 17       | 0.47          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,230) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:7:PHE:HB3 | 17       | 0.47          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:7:PHE:HB2 | 19       | 0.47          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:7:PHE:HB3 | 19       | 0.47          |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:4:LEU:HG  | 2        | 0.47          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1        | 0.47          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1        | 0.47          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD1 | 3        | 0.47          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD2 | 3        | 0.47          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD1 | 6        | 0.47          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD2 | 6        | 0.47          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD1 | 7        | 0.47          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD2 | 7        | 0.47          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD1 | 10       | 0.47          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD2 | 10       | 0.47          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD1 | 16       | 0.47          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD2 | 16       | 0.47          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD1 | 18       | 0.47          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD2 | 18       | 0.47          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD1 | 20       | 0.47          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD2 | 20       | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 2        | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 2        | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 3        | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 3        | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 5        | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 5        | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 10       | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 10       | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 11       | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 11       | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 13       | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 13       | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 15       | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 15       | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 17       | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 17       | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 19       | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 19       | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 20       | 0.47          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 20       | 0.47          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 2        | 0.47          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 2        | 0.47          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 3        | 0.47          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 3        | 0.47          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 5        | 0.47          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 5        | 0.47          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 10       | 0.47          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 10       | 0.47          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 11       | 0.47          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 11       | 0.47          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 13       | 0.47          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 13       | 0.47          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 15       | 0.47          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 15       | 0.47          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 17       | 0.47          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 17       | 0.47          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 19       | 0.47          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 19       | 0.47          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 20       | 0.47          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 20       | 0.47          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:6:ALA:H   | 3        | 0.47          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:6:ALA:H   | 3        | 0.47          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:6:ALA:H   | 11       | 0.47          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:6:ALA:H   | 11       | 0.47          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:6:ALA:H   | 14       | 0.47          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:6:ALA:H   | 14       | 0.47          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:6:ALA:H   | 15       | 0.47          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:6:ALA:H   | 15       | 0.47          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:6:ALA:H   | 17       | 0.47          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:6:ALA:H   | 17       | 0.47          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:6:ALA:H   | 20       | 0.47          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:6:ALA:H   | 20       | 0.47          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 3        | 0.47          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 3        | 0.47          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 3        | 0.47          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 3        | 0.47          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 9        | 0.47          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 9        | 0.47          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 9        | 0.47          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 9        | 0.47          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 20       | 0.47          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 20       | 0.47          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 20       | 0.47          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 20       | 0.47          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB2  | 3        | 0.47          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB3  | 3        | 0.47          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB2  | 3        | 0.47          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB3  | 3        | 0.47          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB2  | 9        | 0.47          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB3  | 9        | 0.47          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB2  | 9        | 0.47          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB3  | 9        | 0.47          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB2  | 20       | 0.47          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB3  | 20       | 0.47          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB2  | 20       | 0.47          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB3  | 20       | 0.47          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:N   | 15       | 0.46          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA  | 9        | 0.46          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA  | 9        | 0.46          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA  | 9        | 0.46          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA  | 9        | 0.46          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA  | 9        | 0.46          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA  | 9        | 0.46          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA  | 14       | 0.46          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA  | 14       | 0.46          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA  | 14       | 0.46          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA  | 14       | 0.46          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA  | 14       | 0.46          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA  | 14       | 0.46          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 19       | 0.46          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 19       | 0.46          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 19       | 0.46          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 19       | 0.46          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 19       | 0.46          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 19       | 0.46          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 19       | 0.46          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 19       | 0.46          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 19       | 0.46          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 19       | 0.46          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 19       | 0.46          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 19       | 0.46          |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H    | 1:A:17:LYS:H   | 15       | 0.46          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:16:LYS:H   | 4        | 0.46          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:16:LYS:H   | 4        | 0.46          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:16:LYS:H   | 8        | 0.46          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:16:LYS:H   | 8        | 0.46          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HE  | 11       | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD2 | 1        | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD3 | 1        | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD2 | 2        | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD3 | 2        | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD2 | 3        | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD3 | 3        | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD2 | 5        | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD3 | 5        | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD2 | 6        | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD3 | 6        | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD2 | 7        | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD3 | 7        | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD2 | 10       | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD3 | 10       | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD2 | 12       | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD3 | 12       | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD2 | 13       | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD3 | 13       | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD2 | 14       | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD3 | 14       | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD2 | 16       | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD3 | 16       | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD2 | 17       | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD3 | 17       | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD2 | 19       | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD3 | 19       | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD2 | 20       | 0.46          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HD3 | 20       | 0.46          |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HE   | 16       | 0.46          |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HE   | 18       | 0.46          |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:17:LYS:H   | 2        | 0.46          |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:17:LYS:H   | 10       | 0.46          |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:17:LYS:H   | 20       | 0.46          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 4        | 0.46          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 4        | 0.46          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H   | 8        | 0.46          |
| (1,674) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H   | 8        | 0.46          |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:13:LEU:H   | 1        | 0.46          |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:13:LEU:H   | 2        | 0.46          |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:13:LEU:H   | 3        | 0.46          |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:13:LEU:H   | 5        | 0.46          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|--------------|----------|---------------|
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:13:LEU:H | 6        | 0.46          |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:13:LEU:H | 7        | 0.46          |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:13:LEU:H | 9        | 0.46          |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:13:LEU:H | 10       | 0.46          |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:13:LEU:H | 11       | 0.46          |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:13:LEU:H | 13       | 0.46          |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:13:LEU:H | 14       | 0.46          |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:13:LEU:H | 15       | 0.46          |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:13:LEU:H | 16       | 0.46          |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:13:LEU:H | 17       | 0.46          |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:13:LEU:H | 18       | 0.46          |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:13:LEU:H | 19       | 0.46          |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:13:LEU:H | 20       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 1        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 1        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 1        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 2        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 2        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 2        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 3        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 3        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 3        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 5        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 5        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 5        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 6        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 6        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 6        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 7        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 7        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 7        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.46          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H   | 13       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H   | 14       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H   | 14       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H   | 14       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H   | 16       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H   | 16       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H   | 16       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H   | 17       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H   | 17       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H   | 17       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H   | 18       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H   | 18       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H   | 18       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H   | 19       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H   | 19       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H   | 19       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H   | 20       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H   | 20       | 0.46          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H   | 20       | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB2 | 3        | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB3 | 3        | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB2 | 3        | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB3 | 3        | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB2 | 5        | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB3 | 5        | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB2 | 5        | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB3 | 5        | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB2 | 9        | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB3 | 9        | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB2 | 9        | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB3 | 9        | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB2 | 14       | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB3 | 14       | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB2 | 14       | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB3 | 14       | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB2 | 16       | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB3 | 16       | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB2 | 16       | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB3 | 16       | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB2 | 17       | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB3 | 17       | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB2 | 17       | 0.46          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HB3  | 17       | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HB2  | 18       | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HB3  | 18       | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HB2  | 18       | 0.46          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HB3  | 18       | 0.46          |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HD2  | 4        | 0.46          |
| (1,559) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HD3  | 4        | 0.46          |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HD2  | 4        | 0.46          |
| (1,558) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:15:ARG:HD3  | 4        | 0.46          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:13:LEU:H    | 15       | 0.46          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:13:LEU:H    | 15       | 0.46          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HD11 | 4        | 0.46          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HD12 | 4        | 0.46          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HD13 | 4        | 0.46          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1  | 1:A:11:PHE:HE1  | 4        | 0.46          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1  | 1:A:11:PHE:HE2  | 4        | 0.46          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2  | 1:A:11:PHE:HE1  | 4        | 0.46          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2  | 1:A:11:PHE:HE2  | 4        | 0.46          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1  | 1:A:11:PHE:HE1  | 8        | 0.46          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1  | 1:A:11:PHE:HE2  | 8        | 0.46          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2  | 1:A:11:PHE:HE1  | 8        | 0.46          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2  | 1:A:11:PHE:HE2  | 8        | 0.46          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1  | 1:A:11:PHE:HE1  | 12       | 0.46          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1  | 1:A:11:PHE:HE2  | 12       | 0.46          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2  | 1:A:11:PHE:HE1  | 12       | 0.46          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2  | 1:A:11:PHE:HE2  | 12       | 0.46          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE1  | 1        | 0.46          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE2  | 1        | 0.46          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE1  | 12       | 0.46          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE2  | 12       | 0.46          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE1  | 19       | 0.46          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE2  | 19       | 0.46          |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HA   | 1        | 0.46          |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HA   | 2        | 0.46          |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HA   | 3        | 0.46          |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HA   | 5        | 0.46          |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HA   | 6        | 0.46          |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HA   | 7        | 0.46          |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HA   | 9        | 0.46          |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HA   | 10       | 0.46          |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HA   | 11       | 0.46          |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HA   | 12       | 0.46          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HA  | 13       | 0.46          |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HA  | 14       | 0.46          |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HA  | 16       | 0.46          |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HA  | 17       | 0.46          |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HA  | 18       | 0.46          |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HA  | 19       | 0.46          |
| (1,393) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HA  | 20       | 0.46          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 4        | 0.46          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 4        | 0.46          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 8        | 0.46          |
| (1,390) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 8        | 0.46          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 4        | 0.46          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 4        | 0.46          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 8        | 0.46          |
| (1,389) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 8        | 0.46          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 2        | 0.46          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 2        | 0.46          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 9        | 0.46          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 9        | 0.46          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 14       | 0.46          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 14       | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 2        | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 2        | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 3        | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 3        | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 6        | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 6        | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 7        | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 7        | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 11       | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 11       | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 14       | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 14       | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 15       | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 15       | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 16       | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 16       | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 18       | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 18       | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 19       | 0.46          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 19       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 2        | 0.46          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 2        | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 2        | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 2        | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 3        | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 3        | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 3        | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 3        | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 6        | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 6        | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 6        | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 6        | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 7        | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 7        | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 7        | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 7        | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 9        | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 9        | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 9        | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 9        | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 10       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 10       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 10       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 10       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 11       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 11       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 11       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 11       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 12       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 12       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 12       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 12       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 13       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 13       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 13       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 13       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 14       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 14       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 14       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 14       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 17       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 17       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 17       | 0.46          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 17       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2  | 18       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3  | 18       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 18       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 18       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2  | 19       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3  | 19       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 19       | 0.46          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 19       | 0.46          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2  | 4        | 0.46          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3  | 4        | 0.46          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 4        | 0.46          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 4        | 0.46          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2  | 8        | 0.46          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3  | 8        | 0.46          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 8        | 0.46          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 8        | 0.46          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.46          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.46          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.46          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.46          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.46          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 1        | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 1        | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 1        | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 1        | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 1        | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 1        | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 1        | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 1        | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 1        | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 1        | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 1        | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 1        | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 18       | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 18       | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 18       | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 18       | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 18       | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 18       | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 18       | 0.46          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 18       | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 18       | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 18       | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 18       | 0.46          |
| (1,35)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 18       | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 2        | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 2        | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 3        | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 3        | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 6        | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 6        | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 7        | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 7        | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 11       | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 11       | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 14       | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 14       | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 15       | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 15       | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 16       | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 16       | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 18       | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 18       | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 19       | 0.46          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 19       | 0.46          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 4        | 0.46          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 4        | 0.46          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 8        | 0.46          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 8        | 0.46          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 10       | 0.46          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 10       | 0.46          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 15       | 0.46          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 15       | 0.46          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 18       | 0.46          |
| (1,297) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 18       | 0.46          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 4        | 0.46          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 4        | 0.46          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 5        | 0.46          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 5        | 0.46          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 8        | 0.46          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 8        | 0.46          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 9        | 0.46          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ  | 9        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 1        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 1        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 1        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 1        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 2        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 2        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 2        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 2        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 5        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 5        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 5        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 5        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 6        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 6        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 6        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 6        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 7        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 7        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 7        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 7        | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 10       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 10       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 10       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 10       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 11       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 11       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 11       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 11       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 12       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 12       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 12       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 12       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 15       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 15       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 15       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 15       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 16       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 16       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 16       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 16       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 17       | 0.46          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2  | 17       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1  | 17       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2  | 17       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1  | 18       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2  | 18       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1  | 18       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2  | 18       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1  | 19       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2  | 19       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1  | 19       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2  | 19       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1  | 20       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2  | 20       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1  | 20       | 0.46          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2  | 20       | 0.46          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 4        | 0.46          |
| (1,267) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 4        | 0.46          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2  | 1        | 0.46          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3  | 1        | 0.46          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2  | 5        | 0.46          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3  | 5        | 0.46          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2  | 12       | 0.46          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3  | 12       | 0.46          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2  | 17       | 0.46          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3  | 17       | 0.46          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2  | 1        | 0.46          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3  | 1        | 0.46          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2  | 5        | 0.46          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3  | 5        | 0.46          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2  | 12       | 0.46          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3  | 12       | 0.46          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2  | 17       | 0.46          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3  | 17       | 0.46          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2  | 14       | 0.46          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3  | 14       | 0.46          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2  | 14       | 0.46          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3  | 14       | 0.46          |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:8:PHE:HZ   | 1        | 0.46          |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:8:PHE:HZ   | 4        | 0.46          |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:8:PHE:HZ   | 5        | 0.46          |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:8:PHE:HZ   | 6        | 0.46          |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:8:PHE:HZ   | 8        | 0.46          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA | 1:A:8:PHE:HZ  | 9        | 0.46          |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA | 1:A:8:PHE:HZ  | 11       | 0.46          |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA | 1:A:8:PHE:HZ  | 12       | 0.46          |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA | 1:A:8:PHE:HZ  | 15       | 0.46          |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA | 1:A:8:PHE:HZ  | 17       | 0.46          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 3        | 0.46          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 3        | 0.46          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 4        | 0.46          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 4        | 0.46          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 7        | 0.46          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 7        | 0.46          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 8        | 0.46          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 8        | 0.46          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 11       | 0.46          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 11       | 0.46          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 12       | 0.46          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 12       | 0.46          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 15       | 0.46          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 15       | 0.46          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE1 | 18       | 0.46          |
| (1,231) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HE2 | 18       | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB2 | 1        | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB3 | 1        | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB2 | 3        | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB3 | 3        | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB2 | 5        | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB3 | 5        | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB2 | 6        | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB3 | 6        | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB2 | 7        | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB3 | 7        | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB2 | 10       | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB3 | 10       | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB2 | 11       | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB3 | 11       | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB2 | 12       | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB3 | 12       | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB2 | 15       | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB3 | 15       | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB2 | 16       | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB3 | 16       | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H  | 1:A:7:PHE:HB2 | 18       | 0.46          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,230) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:7:PHE:HB3 | 18       | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:7:PHE:HB2 | 20       | 0.46          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:7:PHE:HB3 | 20       | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 1        | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 1        | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 3        | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 3        | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 6        | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 6        | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 7        | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 7        | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 10       | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 10       | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 11       | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 11       | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 12       | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 12       | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 15       | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 15       | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 16       | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 16       | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 18       | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 18       | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 20       | 0.46          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 20       | 0.46          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H   | 9        | 0.46          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H   | 9        | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 1        | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 1        | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 1        | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 1        | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 2        | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 2        | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 2        | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 2        | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 9        | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 9        | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 9        | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 9        | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 13       | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 13       | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 13       | 0.46          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 13       | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 16       | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 16       | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 16       | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 16       | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 17       | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 17       | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 17       | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 17       | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 18       | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 18       | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 18       | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 18       | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 19       | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 19       | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 19       | 0.46          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 19       | 0.46          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H   | 9        | 0.46          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H   | 9        | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 1        | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 1        | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 1        | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 1        | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 2        | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 2        | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 2        | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 2        | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 9        | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 9        | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 9        | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 9        | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 13       | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 13       | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 13       | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 13       | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 16       | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 16       | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 16       | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 16       | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 17       | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 17       | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 17       | 0.46          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:7:PHE:HB3 | 17       | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:7:PHE:HB2 | 18       | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:7:PHE:HB3 | 18       | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:7:PHE:HB2 | 18       | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:7:PHE:HB3 | 18       | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:7:PHE:HB2 | 19       | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:7:PHE:HB3 | 19       | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:7:PHE:HB2 | 19       | 0.46          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:7:PHE:HB3 | 19       | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE1 | 1        | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE2 | 1        | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE1 | 2        | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE2 | 2        | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE1 | 5        | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE2 | 5        | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE1 | 7        | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE2 | 7        | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE1 | 9        | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE2 | 9        | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE1 | 11       | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE2 | 11       | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE1 | 12       | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE2 | 12       | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE1 | 13       | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE2 | 13       | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE1 | 14       | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE2 | 14       | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE1 | 15       | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE2 | 15       | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE1 | 19       | 0.46          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE2 | 19       | 0.46          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA  | 14       | 0.46          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA  | 14       | 0.46          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA  | 14       | 0.46          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA  | 14       | 0.46          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA  | 14       | 0.46          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA  | 14       | 0.46          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA  | 14       | 0.46          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA  | 14       | 0.46          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA  | 14       | 0.46          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA  | 14       | 0.46          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA  | 14       | 0.46          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA  | 14       | 0.46          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HD1 | 11       | 0.46          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HD2 | 11       | 0.46          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HD1 | 12       | 0.46          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HD2 | 12       | 0.46          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HD1 | 15       | 0.46          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HD2 | 15       | 0.46          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 1        | 0.46          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 1        | 0.46          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 6        | 0.46          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 6        | 0.46          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 7        | 0.46          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 7        | 0.46          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 9        | 0.46          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 9        | 0.46          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 12       | 0.46          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 12       | 0.46          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 16       | 0.46          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 16       | 0.46          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 18       | 0.46          |
| (1,172) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 18       | 0.46          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 1        | 0.46          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 1        | 0.46          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 6        | 0.46          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 6        | 0.46          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 7        | 0.46          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 7        | 0.46          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 9        | 0.46          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 9        | 0.46          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 12       | 0.46          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 12       | 0.46          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 16       | 0.46          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 16       | 0.46          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:7:PHE:HZ  | 18       | 0.46          |
| (1,169) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:7:PHE:HZ  | 18       | 0.46          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:6:ALA:H   | 5        | 0.46          |
| (1,115) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:6:ALA:H   | 5        | 0.46          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:HB2 | 17       | 0.46          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:HB3 | 17       | 0.46          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:HB2 | 17       | 0.46          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:HB3 | 17       | 0.46          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:HB2 | 19       | 0.46          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB3 | 19       | 0.46          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB2 | 19       | 0.46          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB3 | 19       | 0.46          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB2 | 17       | 0.46          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB3 | 17       | 0.46          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB2 | 17       | 0.46          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB3 | 17       | 0.46          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB2 | 19       | 0.46          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB3 | 19       | 0.46          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB2 | 19       | 0.46          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB3 | 19       | 0.46          |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HA  | 1        | 0.46          |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HA  | 12       | 0.46          |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HA  | 16       | 0.46          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:N  | 1        | 0.45          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:N  | 2        | 0.45          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:N  | 3        | 0.45          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:N  | 5        | 0.45          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:N  | 6        | 0.45          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:N  | 7        | 0.45          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:N  | 9        | 0.45          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:N  | 10       | 0.45          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:N  | 11       | 0.45          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:N  | 12       | 0.45          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:N  | 13       | 0.45          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:N  | 14       | 0.45          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:N  | 16       | 0.45          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:N  | 17       | 0.45          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:N  | 18       | 0.45          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:N  | 19       | 0.45          |
| (3,6)   | 1:A:8:PHE:O     | 1:A:12:ILE:N  | 20       | 0.45          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA | 1        | 0.45          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA | 1        | 0.45          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA | 1        | 0.45          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA | 1        | 0.45          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA | 1        | 0.45          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA | 1        | 0.45          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA | 2        | 0.45          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA | 2        | 0.45          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA | 2        | 0.45          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA | 2        | 0.45          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA | 2        | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA | 2        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA | 3        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA | 3        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA | 3        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA | 3        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA | 3        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA | 3        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA | 5        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA | 5        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA | 5        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA | 5        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA | 5        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA | 5        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA | 6        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA | 6        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA | 6        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA | 6        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA | 6        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA | 6        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA | 7        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA | 7        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA | 7        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA | 7        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA | 7        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA | 7        | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA | 10       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA | 10       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA | 10       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA | 10       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA | 10       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA | 10       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA | 12       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA | 12       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA | 12       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA | 12       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA | 12       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA | 12       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA | 13       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA | 13       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA | 13       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA | 13       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA | 13       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA  | 13       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA  | 16       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA  | 16       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA  | 16       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA  | 16       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA  | 16       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA  | 16       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA  | 17       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA  | 17       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA  | 17       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA  | 17       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA  | 17       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA  | 17       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA  | 18       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA  | 18       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA  | 18       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA  | 18       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA  | 18       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA  | 18       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA  | 19       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA  | 19       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA  | 19       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA  | 19       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA  | 19       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA  | 19       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA  | 20       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA  | 20       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA  | 20       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA  | 20       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA  | 20       | 0.45          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA  | 20       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 1        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 1        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 1        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 1        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 1        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 1        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 1        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 1        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 1        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 1        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 1        | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 1        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 2        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 2        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 2        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 2        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 2        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 2        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 2        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 2        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 2        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 2        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 2        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 2        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 3        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 3        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 3        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 3        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 3        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 3        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 3        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 3        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 3        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 3        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 3        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 3        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 5        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 5        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 5        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 5        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 5        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 5        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 5        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 5        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 5        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 5        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 5        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 5        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 6        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 6        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 6        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 6        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 6        | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 6        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 6        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 6        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 6        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 6        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 6        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 6        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 7        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 7        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 7        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 7        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 7        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 7        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 7        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 7        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 7        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 7        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 7        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 7        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 9        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 9        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 9        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 9        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 9        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 9        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 9        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 9        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 9        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 9        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 9        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 9        | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 10       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 10       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 10       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 10       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 10       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 10       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 10       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 10       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 10       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 10       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 10       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 10       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 12       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 12       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 12       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 12       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 12       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 12       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 12       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 12       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 12       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 12       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 12       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 12       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 13       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 13       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 13       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 13       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 13       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 13       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 13       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 13       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 13       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 13       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 13       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 13       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 14       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 14       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 14       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 14       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 14       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 14       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 14       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 14       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 14       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 14       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 14       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 14       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 16       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 16       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 16       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 16       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 16       | 0.45          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 16       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 16       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 16       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 16       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 16       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 16       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 16       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 17       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 17       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 17       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 17       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 17       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 17       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 17       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 17       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 17       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 17       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 17       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 17       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 18       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 18       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 18       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 18       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 18       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 18       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 18       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 18       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 18       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 18       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 18       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 18       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 20       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 20       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 20       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 20       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 20       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 20       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 20       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 20       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 20       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 20       | 0.45          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 20       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3  | 20       | 0.45          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA    | 1:A:12:ILE:HD11 | 15       | 0.45          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA    | 1:A:12:ILE:HD12 | 15       | 0.45          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA    | 1:A:12:ILE:HD13 | 15       | 0.45          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA    | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.45          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA    | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.45          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA    | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.45          |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H    | 1:A:17:LYS:H    | 4        | 0.45          |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H    | 1:A:17:LYS:H    | 8        | 0.45          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HA   | 15       | 0.45          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:16:LYS:HA   | 15       | 0.45          |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HE   | 5        | 0.45          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD2  | 4        | 0.45          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD3  | 4        | 0.45          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD2  | 8        | 0.45          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD3  | 8        | 0.45          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD2  | 9        | 0.45          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD3  | 9        | 0.45          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD2  | 18       | 0.45          |
| (1,681) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:15:ARG:HD3  | 18       | 0.45          |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HE    | 2        | 0.45          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2  | 1:A:17:LYS:HA   | 10       | 0.45          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3  | 1:A:17:LYS:HA   | 10       | 0.45          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2  | 1:A:17:LYS:HA   | 14       | 0.45          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3  | 1:A:17:LYS:HA   | 14       | 0.45          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2  | 1:A:17:LYS:HA   | 17       | 0.45          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3  | 1:A:17:LYS:HA   | 17       | 0.45          |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:17:LYS:H    | 3        | 0.45          |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:17:LYS:H    | 13       | 0.45          |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:17:LYS:H    | 14       | 0.45          |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:17:LYS:H    | 16       | 0.45          |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:17:LYS:H    | 17       | 0.45          |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:17:LYS:H    | 18       | 0.45          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:7:PHE:HE1   | 1        | 0.45          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:7:PHE:HE2   | 1        | 0.45          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:7:PHE:HE1   | 1        | 0.45          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:7:PHE:HE2   | 1        | 0.45          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:7:PHE:HE1   | 9        | 0.45          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2   | 1:A:7:PHE:HE2   | 9        | 0.45          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:7:PHE:HE1   | 9        | 0.45          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:7:PHE:HE2   | 9        | 0.45          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG2  | 11       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:14:GLN:HG3 | 11       | 0.45          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H   | 11       | 0.45          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H   | 11       | 0.45          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H   | 11       | 0.45          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.45          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.45          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB2 | 1        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB3 | 1        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB2 | 1        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB3 | 1        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB2 | 2        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB3 | 2        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB2 | 2        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB3 | 2        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB2 | 4        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB3 | 4        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB2 | 4        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB3 | 4        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB2 | 6        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB3 | 6        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB2 | 6        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB3 | 6        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB2 | 7        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB3 | 7        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB2 | 7        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB3 | 7        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB2 | 8        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB3 | 8        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB2 | 8        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB3 | 8        | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB2 | 10       | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB3 | 10       | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB2 | 10       | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB3 | 10       | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB2 | 13       | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB3 | 13       | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB2 | 13       | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB3 | 13       | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB2 | 19       | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HB3 | 19       | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HB2 | 19       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HB3 | 19       | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HB2 | 20       | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HB3 | 20       | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HB2 | 20       | 0.45          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HB3 | 20       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:H   | 1        | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:H   | 1        | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:H   | 2        | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:H   | 2        | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:H   | 3        | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:H   | 3        | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:H   | 5        | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:H   | 5        | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:H   | 6        | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:H   | 6        | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:H   | 7        | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:H   | 7        | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:H   | 9        | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:H   | 9        | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:H   | 10       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:H   | 10       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:H   | 11       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:H   | 11       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:H   | 12       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:H   | 12       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:H   | 13       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:H   | 13       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:H   | 14       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:H   | 14       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:H   | 15       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:H   | 15       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:H   | 16       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:H   | 16       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:H   | 17       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:H   | 17       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:H   | 18       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:H   | 18       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:H   | 19       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:H   | 19       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:H   | 20       | 0.45          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:H   | 20       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 1        | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 1        | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 2        | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 2        | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 3        | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 3        | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 5        | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 5        | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 6        | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 6        | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 7        | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 7        | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 9        | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 9        | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 10       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 10       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 11       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 11       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 12       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 12       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 13       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 13       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 14       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 14       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 15       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 15       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 16       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 16       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 17       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 17       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 18       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 18       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 19       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 19       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 20       | 0.45          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 20       | 0.45          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.45          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.45          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 10       | 0.45          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 10       | 0.45          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 16       | 0.45          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 16       | 0.45          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 19       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 19       | 0.45          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 20       | 0.45          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 20       | 0.45          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 6        | 0.45          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 6        | 0.45          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 10       | 0.45          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 10       | 0.45          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 16       | 0.45          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 16       | 0.45          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 19       | 0.45          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 19       | 0.45          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 20       | 0.45          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 20       | 0.45          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 7        | 0.45          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 7        | 0.45          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 7        | 0.45          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 8        | 0.45          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 8        | 0.45          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 8        | 0.45          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 12       | 0.45          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 12       | 0.45          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 12       | 0.45          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 16       | 0.45          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 16       | 0.45          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 16       | 0.45          |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H    | 4        | 0.45          |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H    | 4        | 0.45          |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG2 | 1:A:10:ASP:H    | 8        | 0.45          |
| (1,440) | 1:A:9:ARG:HG3 | 1:A:10:ASP:H    | 8        | 0.45          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB2  | 15       | 0.45          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB3  | 15       | 0.45          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB2  | 15       | 0.45          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB3  | 15       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 1        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 1        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 1        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 1        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 2        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 2        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 2        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 2        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 3        | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 3        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 3        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 3        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 6        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 6        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 6        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 6        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 7        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 7        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 7        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 7        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 9        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 9        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 9        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 9        | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 10       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 10       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 10       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 10       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 13       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 13       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 13       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 13       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 14       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 14       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 14       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 14       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 16       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 16       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 17       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 17       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 17       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 17       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 19       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 19       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 19       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 19       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.45          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 1        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 1        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 1        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 1        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 2        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 2        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 2        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 2        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 3        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 3        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 3        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 3        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 4        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 4        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 4        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 4        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 7        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 7        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 7        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 7        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 8        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 8        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 8        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 8        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 9        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 9        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 9        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 9        | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 10       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 10       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 10       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 10       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 11       | 0.45          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 11       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 11       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 11       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 12       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 12       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 12       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 12       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 13       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 13       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 13       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 13       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 14       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 14       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 14       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 14       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 15       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 15       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 15       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 15       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 16       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 16       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 16       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 16       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 18       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 18       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 18       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 18       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 19       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 19       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 19       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 19       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 20       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 20       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 20       | 0.45          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 20       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 1        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 1        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 1        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 1        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 2        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 2        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 2        | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 2        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 3        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 3        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 3        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 3        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 4        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 4        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 4        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 4        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 7        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 7        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 7        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 7        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 8        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 8        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 8        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 8        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 9        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 9        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 9        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 9        | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 10       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 10       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 10       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 10       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 11       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 11       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 11       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 11       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 12       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 12       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 12       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 12       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 13       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 13       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 13       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 13       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 14       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 14       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 14       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 14       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 15       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 15       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 15       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 15       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 16       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 16       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 16       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 16       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 18       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 18       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 18       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 18       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 19       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 19       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 19       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 19       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 20       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 20       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 20       | 0.45          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 20       | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE1 | 2        | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE2 | 2        | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE1 | 3        | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE2 | 3        | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE1 | 4        | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE2 | 4        | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE1 | 5        | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE2 | 5        | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE1 | 6        | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE2 | 6        | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE1 | 7        | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE2 | 7        | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE1 | 8        | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE2 | 8        | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE1 | 9        | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE2 | 9        | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE1 | 10       | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE2 | 10       | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE1 | 11       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|----------------|----------|---------------|
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 11       | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 13       | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 13       | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 14       | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 14       | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 16       | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 17       | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 17       | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.45          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 1        | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 1        | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 3        | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 3        | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 5        | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 5        | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 6        | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 6        | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 7        | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 7        | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 10       | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 10       | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 11       | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 11       | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 12       | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 12       | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 13       | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 13       | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 15       | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 15       | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 16       | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 16       | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 17       | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 17       | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 18       | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 18       | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 19       | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 19       | 0.45          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 20       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:10:ASP:HB3  | 20       | 0.45          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H     | 1        | 0.45          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H     | 1        | 0.45          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H     | 13       | 0.45          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H     | 13       | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2  | 1        | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3  | 1        | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 1        | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 1        | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2  | 5        | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3  | 5        | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 5        | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 5        | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2  | 15       | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3  | 15       | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 15       | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 15       | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2  | 16       | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3  | 16       | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 16       | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 16       | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2  | 20       | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3  | 20       | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 20       | 0.45          |
| (1,365) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 20       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.45          |
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,360) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 2        | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 2        | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 2        | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 2        | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 2        | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 2        | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 2        | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 2        | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 2        | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 2        | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 2        | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 2        | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 13       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 13       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 13       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 13       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 13       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 13       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 13       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 13       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 13       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 13       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 13       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 13       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 14       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 14       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 14       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 14       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 14       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 14       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 14       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 14       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 14       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 14       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 14       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 14       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 19       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 19       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 19       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 19       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 19       | 0.45          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 19       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 19       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 19       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 19       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 19       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 19       | 0.45          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 19       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 2        | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 2        | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 2        | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 7        | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 7        | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 7        | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 11       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 11       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 11       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 12       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 12       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 12       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 13       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 13       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 13       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 14       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 14       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 14       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 15       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 15       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 15       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 16       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 16       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 16       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 19       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 19       | 0.45          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 19       | 0.45          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H     | 1        | 0.45          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H     | 1        | 0.45          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H     | 13       | 0.45          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H     | 13       | 0.45          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 2        | 0.45          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 2        | 0.45          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 2        | 0.45          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 2        | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 2        | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 2        | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 2        | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 2        | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 2        | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 2        | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 2        | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 2        | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 13       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 13       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 13       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 13       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 13       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 13       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 13       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 13       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 13       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 13       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 13       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 13       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 14       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 14       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 14       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 14       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 14       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 14       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 14       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 14       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 14       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 14       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 14       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 14       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 19       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 19       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 19       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 19       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 19       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 19       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 19       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 19       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 19       | 0.45          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 19       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 19       | 0.45          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 19       | 0.45          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2 | 1        | 0.45          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 1        | 0.45          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2 | 7        | 0.45          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 7        | 0.45          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2 | 12       | 0.45          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 12       | 0.45          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 4        | 0.45          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 4        | 0.45          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 8        | 0.45          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 8        | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 1        | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 1        | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 2        | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 2        | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 3        | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 3        | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 6        | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 6        | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 7        | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 7        | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 10       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 10       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 11       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 11       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 12       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 12       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 13       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 13       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 14       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 14       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 15       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 15       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 16       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 16       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 17       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 17       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 18       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 18       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 19       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 19       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ  | 20       | 0.45          |
| (1,292) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ  | 20       | 0.45          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 3        | 0.45          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 3        | 0.45          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 3        | 0.45          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 3        | 0.45          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 9        | 0.45          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 9        | 0.45          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 9        | 0.45          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 9        | 0.45          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 13       | 0.45          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 13       | 0.45          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 13       | 0.45          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 13       | 0.45          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 14       | 0.45          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 14       | 0.45          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 14       | 0.45          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 14       | 0.45          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 1        | 0.45          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 2        | 0.45          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 3        | 0.45          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 4        | 0.45          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 5        | 0.45          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 6        | 0.45          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 7        | 0.45          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 8        | 0.45          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 9        | 0.45          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 10       | 0.45          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 11       | 0.45          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 12       | 0.45          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 13       | 0.45          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 14       | 0.45          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 15       | 0.45          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 16       | 0.45          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 18       | 0.45          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 19       | 0.45          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 20       | 0.45          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H   | 3        | 0.45          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 3        | 0.45          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 3        | 0.45          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H   | 11       | 0.45          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 11       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 11       | 0.45          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H   | 15       | 0.45          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 15       | 0.45          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 15       | 0.45          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H   | 18       | 0.45          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 18       | 0.45          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 18       | 0.45          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H   | 20       | 0.45          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 20       | 0.45          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 20       | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 8        | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 8        | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.45          |
| (1,251) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 8        | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 8        | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.45          |
| (1,250) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.45          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 2        | 0.45          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 2        | 0.45          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 2        | 0.45          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 2        | 0.45          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 5        | 0.45          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 5        | 0.45          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 5        | 0.45          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 5        | 0.45          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 13       | 0.45          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 13       | 0.45          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 13       | 0.45          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 13       | 0.45          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 19       | 0.45          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 19       | 0.45          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 19       | 0.45          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 19       | 0.45          |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:8:PHE:HZ  | 3        | 0.45          |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:8:PHE:HZ  | 7        | 0.45          |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:8:PHE:HZ  | 10       | 0.45          |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:8:PHE:HZ  | 16       | 0.45          |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:8:PHE:HZ  | 18       | 0.45          |
| (1,234) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:8:PHE:HZ  | 20       | 0.45          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:7:PHE:HB2 | 4        | 0.45          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:7:PHE:HB3 | 4        | 0.45          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:7:PHE:HB2 | 8        | 0.45          |
| (1,230) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:7:PHE:HB3 | 8        | 0.45          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H   | 13       | 0.45          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H   | 13       | 0.45          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H   | 17       | 0.45          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H   | 17       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 3        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 3        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 3        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 3        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 4        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 4        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 4        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 4        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 5        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 5        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 5        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 5        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 6        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 6        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 6        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 6        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 7        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 7        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 7        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 7        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 8        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 8        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 8        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 8        | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 10       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 10       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 10       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 10       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 11       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 11       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 11       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 11       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 12       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 12       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 12       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 12       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 14       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 14       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 14       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 14       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 15       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 15       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 15       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 15       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 20       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 20       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 20       | 0.45          |
| (1,227) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 20       | 0.45          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H   | 13       | 0.45          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H   | 13       | 0.45          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H   | 17       | 0.45          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H   | 17       | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 1        | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 1        | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 1        | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 1        | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 7        | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 7        | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 7        | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 7        | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 9        | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 9        | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 9        | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 9        | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 10       | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 10       | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 10       | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 10       | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 11       | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 11       | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 11       | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 11       | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 12       | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 12       | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 12       | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 12       | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 15       | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 15       | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 15       | 0.45          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 15       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 3        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 3        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 3        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 3        | 0.45          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 4        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 4        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 4        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 4        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 5        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 5        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 5        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 5        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 6        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 6        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 6        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 6        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 7        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 7        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 7        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 7        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 8        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 8        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 8        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 8        | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 10       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 10       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 10       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 10       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 11       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 11       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 11       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 11       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 12       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 12       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 12       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 12       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 14       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 14       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 14       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 14       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 15       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 15       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB2 | 15       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HB3 | 15       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB2 | 20       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HB3 | 20       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:7:PHE:HB2 | 20       | 0.45          |
| (1,224) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:7:PHE:HB3 | 20       | 0.45          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE1 | 3        | 0.45          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE2 | 3        | 0.45          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE1 | 6        | 0.45          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE2 | 6        | 0.45          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE1 | 10       | 0.45          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE2 | 10       | 0.45          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE1 | 16       | 0.45          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE2 | 16       | 0.45          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE1 | 17       | 0.45          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE2 | 17       | 0.45          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE1 | 18       | 0.45          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE2 | 18       | 0.45          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE1 | 20       | 0.45          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HE2 | 20       | 0.45          |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:4:LEU:HG  | 14       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA  | 2        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA  | 2        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA  | 2        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA  | 2        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA  | 2        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA  | 2        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA  | 3        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA  | 3        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA  | 3        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA  | 3        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA  | 3        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA  | 3        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA  | 4        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA  | 4        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA  | 4        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA  | 4        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA  | 4        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA  | 4        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA  | 5        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA  | 5        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA  | 5        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA  | 5        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA  | 5        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA  | 5        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA  | 8        | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|--------------|----------|---------------|
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 8        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 8        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 8        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 8        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 8        | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 10       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 10       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 10       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 10       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 10       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 10       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 11       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 11       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 11       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 11       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 11       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 11       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 13       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 13       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 13       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 13       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 13       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 13       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 17       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 17       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 17       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 17       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 17       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 17       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 19       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 19       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 19       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 19       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 19       | 0.45          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 19       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 2        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 2        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 2        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 2        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 2        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 2        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 3        | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|--------------|----------|---------------|
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 3        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 3        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 3        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 3        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 3        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 4        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 4        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 4        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 4        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 4        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 4        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 5        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 5        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 5        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 5        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 5        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 5        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 8        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 8        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 8        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 8        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 8        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 8        | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 10       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 10       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 10       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 10       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 10       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 10       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 11       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 11       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 11       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 11       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 11       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 11       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 13       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 13       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 13       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 13       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 13       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 13       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 17       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA  | 17       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA  | 17       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA  | 17       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA  | 17       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA  | 17       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA  | 19       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA  | 19       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA  | 19       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA  | 19       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA  | 19       | 0.45          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA  | 19       | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 2        | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 2        | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 3        | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 3        | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 4        | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 4        | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 5        | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 5        | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 8        | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 8        | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 10       | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 10       | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 11       | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 11       | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 13       | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 13       | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 14       | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 14       | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 15       | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 15       | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 17       | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 17       | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 19       | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 19       | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 20       | 0.45          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 20       | 0.45          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HD1 | 4        | 0.45          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HD2 | 4        | 0.45          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HD1 | 8        | 0.45          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HD2 | 8        | 0.45          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HD1 | 17       | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD2 | 17       | 0.45          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 1        | 0.45          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 2        | 0.45          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 3        | 0.45          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 4        | 0.45          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 5        | 0.45          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 6        | 0.45          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 7        | 0.45          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 8        | 0.45          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 10       | 0.45          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 11       | 0.45          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 13       | 0.45          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 17       | 0.45          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 18       | 0.45          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 19       | 0.45          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 20       | 0.45          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 19       | 0.45          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 19       | 0.45          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 19       | 0.45          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 19       | 0.45          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 19       | 0.45          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 19       | 0.45          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:5:SER:H   | 4        | 0.45          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:5:SER:H   | 4        | 0.45          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:5:SER:H   | 6        | 0.45          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:5:SER:H   | 6        | 0.45          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:5:SER:H   | 7        | 0.45          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:5:SER:H   | 7        | 0.45          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:5:SER:H   | 8        | 0.45          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:5:SER:H   | 8        | 0.45          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:5:SER:H   | 10       | 0.45          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:5:SER:H   | 10       | 0.45          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:5:SER:H   | 18       | 0.45          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:5:SER:H   | 18       | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 1        | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 1        | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 1        | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 1        | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 2        | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 2        | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 2        | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 2        | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 4        | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 4        | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 4        | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 4        | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 7        | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 7        | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 7        | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 7        | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 8        | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 8        | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 8        | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 8        | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 10       | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 10       | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 10       | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 10       | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 12       | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 12       | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 12       | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 12       | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 13       | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 13       | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 13       | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 13       | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 18       | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 18       | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 18       | 0.45          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 18       | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 1        | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 1        | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 1        | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 1        | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 2        | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 2        | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 2        | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 2        | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 4        | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 4        | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 4        | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 4        | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 7        | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 7        | 0.45          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB2  | 7        | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB3  | 7        | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB2  | 8        | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB3  | 8        | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB2  | 8        | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB3  | 8        | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB2  | 10       | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB3  | 10       | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB2  | 10       | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB3  | 10       | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB2  | 12       | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB3  | 12       | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB2  | 12       | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB3  | 12       | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB2  | 13       | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB3  | 13       | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB2  | 13       | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB3  | 13       | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB2  | 18       | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:HB3  | 18       | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB2  | 18       | 0.45          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:HB3  | 18       | 0.45          |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HA   | 4        | 0.45          |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HA   | 6        | 0.45          |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HA   | 7        | 0.45          |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HA   | 8        | 0.45          |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HA   | 10       | 0.45          |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HA   | 18       | 0.45          |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HA   | 19       | 0.45          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2 | 11       | 0.44          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3 | 11       | 0.44          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2 | 11       | 0.44          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3 | 11       | 0.44          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2 | 11       | 0.44          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3 | 11       | 0.44          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2 | 11       | 0.44          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3 | 11       | 0.44          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2 | 11       | 0.44          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3 | 11       | 0.44          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2 | 11       | 0.44          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3 | 11       | 0.44          |
| (2,39)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HA  | 11       | 0.44          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HA | 11       | 0.44          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HA | 11       | 0.44          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HA | 11       | 0.44          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HA | 11       | 0.44          |
| (2,39) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HA | 11       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H  | 1        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H  | 1        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H  | 1        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H  | 1        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H  | 1        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H  | 1        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H  | 2        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H  | 2        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H  | 2        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H  | 2        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H  | 2        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H  | 2        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H  | 3        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H  | 3        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H  | 3        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H  | 3        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H  | 3        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H  | 3        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H  | 5        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H  | 5        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H  | 5        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H  | 5        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H  | 5        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H  | 5        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H  | 6        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H  | 6        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H  | 6        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H  | 6        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H  | 6        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H  | 6        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H  | 7        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H  | 7        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H  | 7        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H  | 7        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H  | 7        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H  | 7        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H  | 9        | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|--------------|----------|---------------|
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 14       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 14       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 14       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H | 14       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H | 14       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H | 14       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 16       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 16       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 16       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H | 16       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H | 16       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H | 16       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 17       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 17       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 17       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H | 17       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H | 17       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H | 17       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 18       | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H    | 18       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H    | 18       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H    | 18       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H    | 18       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H    | 18       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H    | 19       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H    | 19       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H    | 19       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H    | 19       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H    | 19       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H    | 19       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.44          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD11 | 1        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD12 | 1        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD13 | 1        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD11 | 1        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD12 | 1        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD13 | 1        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD11 | 9        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD12 | 9        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD13 | 9        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD11 | 9        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD12 | 9        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD13 | 9        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD11 | 14       | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 14       | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 14       | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 14       | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 14       | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 14       | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.44          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 2        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 2        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 2        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 3        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 3        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 3        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 5        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 5        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 5        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 6        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 6        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 6        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.44          |
| (2,1)  | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 7        | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key   | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|-------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 7        | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 7        | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 9        | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 9        | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 9        | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 10       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 10       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 10       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 11       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 11       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 11       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 12       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 12       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 12       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 13       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 13       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 13       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 14       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 14       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 14       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.44          |
| (2,1) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 16       | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 16       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 16       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 17       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 17       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 17       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 18       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 18       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 18       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 19       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 19       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 19       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 20       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 20       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 20       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.44          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.44          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:16:LYS:HE2  | 1        | 0.44          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:16:LYS:HE3  | 1        | 0.44          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:16:LYS:HE2  | 2        | 0.44          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:16:LYS:HE3  | 2        | 0.44          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:16:LYS:HE2  | 3        | 0.44          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:16:LYS:HE3  | 3        | 0.44          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:16:LYS:HE2  | 5        | 0.44          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:16:LYS:HE3  | 5        | 0.44          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:16:LYS:HE2  | 6        | 0.44          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:16:LYS:HE3  | 6        | 0.44          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:16:LYS:HE2  | 7        | 0.44          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:16:LYS:HE3  | 7        | 0.44          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:16:LYS:HE2  | 10       | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:16:LYS:HE3 | 10       | 0.44          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:16:LYS:HE2 | 12       | 0.44          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:16:LYS:HE3 | 12       | 0.44          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:16:LYS:HE2 | 13       | 0.44          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:16:LYS:HE3 | 13       | 0.44          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:16:LYS:HE2 | 14       | 0.44          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:16:LYS:HE3 | 14       | 0.44          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB2 | 11       | 0.44          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB3 | 11       | 0.44          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HA  | 2        | 0.44          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HA  | 3        | 0.44          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HA  | 6        | 0.44          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HA  | 9        | 0.44          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HA  | 10       | 0.44          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HA  | 12       | 0.44          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HA  | 13       | 0.44          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HA  | 14       | 0.44          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HA  | 16       | 0.44          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HA  | 17       | 0.44          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HA  | 18       | 0.44          |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HE  | 1        | 0.44          |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HE  | 2        | 0.44          |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HE  | 6        | 0.44          |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HE  | 7        | 0.44          |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HE  | 9        | 0.44          |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HE  | 13       | 0.44          |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HE  | 14       | 0.44          |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HE  | 16       | 0.44          |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HE  | 17       | 0.44          |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HE  | 18       | 0.44          |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HE  | 19       | 0.44          |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HE  | 20       | 0.44          |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HE   | 6        | 0.44          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2 | 1:A:17:LYS:HA  | 2        | 0.44          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3 | 1:A:17:LYS:HA  | 2        | 0.44          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2 | 1:A:17:LYS:HA  | 3        | 0.44          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3 | 1:A:17:LYS:HA  | 3        | 0.44          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2 | 1:A:17:LYS:HA  | 13       | 0.44          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3 | 1:A:17:LYS:HA  | 13       | 0.44          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2 | 1:A:17:LYS:HA  | 16       | 0.44          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3 | 1:A:17:LYS:HA  | 16       | 0.44          |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:17:LYS:H   | 9        | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 3        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 3        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 3        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 3        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 4        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 4        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 4        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 4        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 6        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 6        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 6        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 6        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 7        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 7        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 7        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 7        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 8        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 8        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 8        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 8        | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 10       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 10       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 10       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 10       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 11       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 11       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 11       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 11       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 12       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 12       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 12       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 12       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 15       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 15       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 15       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 15       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 16       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 16       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 16       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 16       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 18       | 0.44          |
| (1,63) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 18       | 0.44          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:7:PHE:HE1  | 18       | 0.44          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:7:PHE:HE2  | 18       | 0.44          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:7:PHE:HE1  | 20       | 0.44          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:7:PHE:HE2  | 20       | 0.44          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:7:PHE:HE1  | 20       | 0.44          |
| (1,63)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:7:PHE:HE2  | 20       | 0.44          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HB2 | 11       | 0.44          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HB3 | 11       | 0.44          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HB2 | 11       | 0.44          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HB3 | 11       | 0.44          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HB2 | 15       | 0.44          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HB3 | 15       | 0.44          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HB2 | 15       | 0.44          |
| (1,563) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HB3 | 15       | 0.44          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HA  | 4        | 0.44          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HA  | 4        | 0.44          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HA  | 8        | 0.44          |
| (1,549) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HA  | 8        | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 1        | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 1        | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 2        | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 2        | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 3        | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 3        | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 5        | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 5        | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 7        | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 7        | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 9        | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 9        | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 11       | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 11       | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 12       | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 12       | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 13       | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 13       | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 14       | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 14       | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 15       | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 15       | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 17       | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 17       | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 18       | 0.44          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 18       | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 1        | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 1        | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 2        | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 2        | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 3        | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 3        | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 5        | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 5        | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 7        | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 7        | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 9        | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 9        | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 11       | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 11       | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 12       | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 12       | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 13       | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 13       | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 14       | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 14       | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 15       | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 15       | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 17       | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 17       | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 18       | 0.44          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 18       | 0.44          |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.44          |
| (1,470) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 1        | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 1        | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 1        | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 2        | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 2        | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 2        | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 3        | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 3        | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 3        | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 5        | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 5        | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 5        | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD11 | 6        | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD12 | 6        | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD13 | 6        | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD11 | 9        | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD12 | 9        | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD13 | 9        | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD11 | 10       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD12 | 10       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD13 | 10       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD11 | 11       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD12 | 11       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD13 | 11       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD11 | 13       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD12 | 13       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD13 | 13       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD11 | 14       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD12 | 14       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD13 | 14       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD11 | 15       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD12 | 15       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD13 | 15       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD11 | 17       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD12 | 17       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD13 | 17       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD11 | 18       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD12 | 18       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD13 | 18       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD11 | 19       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD12 | 19       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD13 | 19       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD11 | 20       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD12 | 20       | 0.44          |
| (1,455) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HD13 | 20       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2  | 1        | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3  | 1        | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2  | 2        | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3  | 2        | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2  | 3        | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3  | 3        | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2  | 5        | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3  | 5        | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2  | 6        | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|----------------|----------|---------------|
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 6        | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 7        | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 7        | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 9        | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 9        | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 10       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 10       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 11       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 11       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 12       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 12       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 13       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 13       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 14       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 14       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 16       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 16       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 17       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 17       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 18       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 18       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 19       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 19       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 20       | 0.44          |
| (1,431) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 20       | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 1        | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 1        | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 2        | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 2        | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 3        | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 3        | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 5        | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 5        | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 6        | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 6        | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 7        | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 7        | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 9        | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 9        | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 10       | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB3 | 10       | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:10:ASP:HB2 | 11       | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 11       | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 12       | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 12       | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 13       | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 13       | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 14       | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 14       | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 16       | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 16       | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 17       | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 17       | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 18       | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 18       | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 19       | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 19       | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 20       | 0.44          |
| (1,430) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 20       | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD2  | 1        | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD3  | 1        | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD2  | 2        | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD3  | 2        | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD2  | 3        | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD3  | 3        | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD2  | 5        | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD3  | 5        | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD2  | 9        | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD3  | 9        | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD2  | 10       | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD3  | 10       | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD2  | 13       | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD3  | 13       | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD2  | 14       | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD3  | 14       | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD2  | 16       | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD3  | 16       | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD2  | 17       | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD3  | 17       | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD2  | 19       | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD3  | 19       | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD2  | 20       | 0.44          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD3  | 20       | 0.44          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HB  | 4        | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HB  | 4        | 0.44          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HB  | 8        | 0.44          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HB  | 8        | 0.44          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 5        | 0.44          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 5        | 0.44          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 5        | 0.44          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 5        | 0.44          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 11       | 0.44          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 11       | 0.44          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 11       | 0.44          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 11       | 0.44          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 15       | 0.44          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 15       | 0.44          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 15       | 0.44          |
| (1,402) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 15       | 0.44          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 5        | 0.44          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 5        | 0.44          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 5        | 0.44          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 5        | 0.44          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 17       | 0.44          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 17       | 0.44          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 17       | 0.44          |
| (1,401) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 17       | 0.44          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 5        | 0.44          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 5        | 0.44          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 5        | 0.44          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 5        | 0.44          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 17       | 0.44          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 17       | 0.44          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 17       | 0.44          |
| (1,400) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 17       | 0.44          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE1 | 15       | 0.44          |
| (1,396) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HE2 | 15       | 0.44          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 5        | 0.44          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 5        | 0.44          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 5        | 0.44          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 5        | 0.44          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 5        | 0.44          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 5        | 0.44          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 5        | 0.44          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 5        | 0.44          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 5        | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 5        | 0.44          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 5        | 0.44          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 5        | 0.44          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 5        | 0.44          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 5        | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 1        | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 1        | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 1        | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 3        | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 3        | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 3        | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 5        | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 5        | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 5        | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 6        | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 6        | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 6        | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 9        | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 9        | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 9        | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 10       | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 10       | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 10       | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 17       | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 17       | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 17       | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 18       | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 18       | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 18       | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 20       | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 20       | 0.44          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 20       | 0.44          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB   | 15       | 0.44          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB   | 15       | 0.44          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 4        | 0.44          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 4        | 0.44          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 4        | 0.44          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 8        | 0.44          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 8        | 0.44          |
| (1,341) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 8        | 0.44          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H     | 5        | 0.44          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H     | 5        | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 5        | 0.44          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 5        | 0.44          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 5        | 0.44          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 5        | 0.44          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 5        | 0.44          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 5        | 0.44          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 5        | 0.44          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 5        | 0.44          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 5        | 0.44          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 5        | 0.44          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 5        | 0.44          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 5        | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 2        | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 2        | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 2        | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 2        | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 3        | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 3        | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 3        | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 3        | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 9        | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 9        | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 9        | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 9        | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 10       | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 10       | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 10       | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 10       | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 14       | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 14       | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 14       | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 14       | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 19       | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 19       | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 19       | 0.44          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 19       | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2 | 2        | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 2        | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2 | 3        | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 3        | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2 | 5        | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 5        | 0.44          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2 | 6        | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 6        | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2 | 9        | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 9        | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2 | 10       | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 10       | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2 | 11       | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 11       | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2 | 13       | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 13       | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2 | 14       | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 14       | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2 | 16       | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 16       | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2 | 17       | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 17       | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2 | 18       | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 18       | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2 | 19       | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 19       | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2 | 20       | 0.44          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 20       | 0.44          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2  | 4        | 0.44          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3  | 4        | 0.44          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2  | 4        | 0.44          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3  | 4        | 0.44          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2  | 8        | 0.44          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3  | 8        | 0.44          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2  | 8        | 0.44          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3  | 8        | 0.44          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 1        | 0.44          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 1        | 0.44          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 12       | 0.44          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 12       | 0.44          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1  | 4        | 0.44          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2  | 4        | 0.44          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1  | 4        | 0.44          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2  | 4        | 0.44          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1  | 8        | 0.44          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2  | 8        | 0.44          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1  | 8        | 0.44          |
| (1,288) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2  | 8        | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1        | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1        | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 2        | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 2        | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 3        | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 3        | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 5        | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 5        | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 6        | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 6        | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 7        | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 7        | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 9        | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 9        | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 10       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 10       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 11       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 11       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 12       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 12       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 13       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 13       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 14       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 14       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 15       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 15       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 16       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 16       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 17       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 17       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 18       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 18       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 19       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 19       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 20       | 0.44          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 20       | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H   | 1        | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H   | 1        | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H   | 1        | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H   | 6        | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H   | 6        | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H   | 6        | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H   | 7        | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H   | 7        | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H   | 7        | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H   | 11       | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H   | 11       | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H   | 11       | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H   | 12       | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H   | 12       | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H   | 12       | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H   | 15       | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H   | 15       | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H   | 15       | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H   | 20       | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H   | 20       | 0.44          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H   | 20       | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 2        | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 2        | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.44          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.44          |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 17       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H   | 1        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 1        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 1        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H   | 2        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 2        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 2        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H   | 4        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 4        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 4        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H   | 5        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 5        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 5        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H   | 6        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 6        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 6        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H   | 7        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 7        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 7        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H   | 8        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 8        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 8        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H   | 9        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 9        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 9        | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H   | 10       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 10       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 10       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H   | 12       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 12       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 12       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H   | 13       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 13       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 13       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H   | 14       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 14       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 14       | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H  | 16       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H  | 16       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H  | 16       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H  | 17       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H  | 17       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H  | 17       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:H  | 19       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:H  | 19       | 0.44          |
| (1,255) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:H  | 19       | 0.44          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H  | 9        | 0.44          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H  | 9        | 0.44          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ | 2        | 0.44          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ | 2        | 0.44          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ | 5        | 0.44          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ | 5        | 0.44          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ | 13       | 0.44          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ | 13       | 0.44          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ | 14       | 0.44          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ | 14       | 0.44          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ | 19       | 0.44          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ | 19       | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H  | 1        | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H  | 1        | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H  | 2        | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H  | 2        | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H  | 3        | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H  | 3        | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H  | 4        | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H  | 4        | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H  | 5        | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H  | 5        | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H  | 6        | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H  | 6        | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H  | 7        | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H  | 7        | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H  | 8        | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H  | 8        | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H  | 10       | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H  | 10       | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H  | 12       | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H  | 12       | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H  | 14       | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2      | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-------------|----------|---------------|
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 14       | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 15       | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 15       | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 16       | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 16       | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 18       | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 18       | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 19       | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 19       | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 20       | 0.44          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 20       | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 1        | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 1        | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 2        | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 2        | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 3        | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 3        | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 4        | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 4        | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 5        | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 5        | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 6        | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 6        | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 7        | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 7        | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 8        | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 8        | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 10       | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 10       | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 12       | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 12       | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 14       | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 14       | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 15       | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 15       | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 16       | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 16       | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 18       | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 18       | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 19       | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H | 19       | 0.44          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H | 20       | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H   | 20       | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 3        | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 3        | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 3        | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 3        | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 4        | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 4        | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 4        | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 4        | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 6        | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 6        | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 6        | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 6        | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 8        | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 8        | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 8        | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 8        | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 14       | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 14       | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 14       | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 14       | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 16       | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 16       | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 16       | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 16       | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 18       | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 18       | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 18       | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 18       | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 20       | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 20       | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 20       | 0.44          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 20       | 0.44          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 4        | 0.44          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 4        | 0.44          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 8        | 0.44          |
| (1,222) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 8        | 0.44          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2 | 11       | 0.44          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB3 | 11       | 0.44          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2 | 12       | 0.44          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB3 | 12       | 0.44          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2 | 15       | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HB3 | 15       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA  | 1        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA  | 1        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA  | 1        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA  | 1        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA  | 1        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA  | 1        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA  | 6        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA  | 6        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA  | 6        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA  | 6        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA  | 6        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA  | 6        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA  | 7        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA  | 7        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA  | 7        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA  | 7        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA  | 7        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA  | 7        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA  | 9        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA  | 9        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA  | 9        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA  | 9        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA  | 9        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA  | 9        | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA  | 12       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA  | 12       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA  | 12       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA  | 12       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA  | 12       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA  | 12       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA  | 15       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA  | 15       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA  | 15       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA  | 15       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA  | 15       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA  | 15       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA  | 16       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA  | 16       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA  | 16       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA  | 16       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA  | 16       | 0.44          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|--------------|----------|---------------|
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 16       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 18       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 18       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 18       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 18       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 18       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 18       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 20       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 20       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 20       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 20       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 20       | 0.44          |
| (1,198) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 20       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 1        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 1        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 1        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 1        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 1        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 1        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 6        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 6        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 6        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 6        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 6        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 6        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 7        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 7        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 7        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 7        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 7        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 7        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 9        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 9        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 9        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 9        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 9        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA | 9        | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA | 12       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA | 12       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA | 12       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA | 12       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA | 12       | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA  | 12       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA  | 15       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA  | 15       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA  | 15       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA  | 15       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA  | 15       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA  | 15       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA  | 16       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA  | 16       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA  | 16       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA  | 16       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA  | 16       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA  | 16       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA  | 18       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA  | 18       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA  | 18       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA  | 18       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA  | 18       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA  | 18       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HA  | 20       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HA  | 20       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HA  | 20       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HA  | 20       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HA  | 20       | 0.44          |
| (1,191) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HA  | 20       | 0.44          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 1        | 0.44          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 1        | 0.44          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 6        | 0.44          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 6        | 0.44          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 7        | 0.44          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 7        | 0.44          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 9        | 0.44          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 9        | 0.44          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 12       | 0.44          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 12       | 0.44          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 16       | 0.44          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 16       | 0.44          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE1 | 18       | 0.44          |
| (1,187) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HE2 | 18       | 0.44          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HD1 | 2        | 0.44          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HD2 | 2        | 0.44          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HD1 | 5        | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD2 | 5        | 0.44          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD1 | 9        | 0.44          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD2 | 9        | 0.44          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD1 | 13       | 0.44          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD2 | 13       | 0.44          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD1 | 14       | 0.44          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD2 | 14       | 0.44          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD1 | 19       | 0.44          |
| (1,183) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HD2 | 19       | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 1        | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 1        | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 2        | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 2        | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 4        | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 4        | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 6        | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 6        | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 7        | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 7        | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 8        | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 8        | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 9        | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 9        | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 10       | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 10       | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 12       | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 12       | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 13       | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 13       | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 14       | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 14       | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 16       | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 16       | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 17       | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 17       | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 18       | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 18       | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 19       | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 19       | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 20       | 0.44          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 20       | 0.44          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:3:ARG:HA  | 1        | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,113) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:3:ARG:HA  | 1        | 0.44          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 9        | 0.44          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 12       | 0.44          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 14       | 0.44          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 15       | 0.44          |
| (1,118) | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:6:ALA:HA  | 16       | 0.44          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 15       | 0.44          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 15       | 0.44          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 15       | 0.44          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 15       | 0.44          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 15       | 0.44          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 15       | 0.44          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 20       | 0.44          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 20       | 0.44          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 20       | 0.44          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 20       | 0.44          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 20       | 0.44          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 20       | 0.44          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:5:SER:H   | 1        | 0.44          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:5:SER:H   | 1        | 0.44          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:5:SER:H   | 3        | 0.44          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:5:SER:H   | 3        | 0.44          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:5:SER:H   | 11       | 0.44          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:5:SER:H   | 11       | 0.44          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:5:SER:H   | 12       | 0.44          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:5:SER:H   | 12       | 0.44          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:5:SER:H   | 13       | 0.44          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:5:SER:H   | 13       | 0.44          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:5:SER:H   | 16       | 0.44          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:5:SER:H   | 16       | 0.44          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 6        | 0.44          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 6        | 0.44          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 6        | 0.44          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 6        | 0.44          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 16       | 0.44          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 16       | 0.44          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 16       | 0.44          |
| (1,108) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 16       | 0.44          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 6        | 0.44          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 6        | 0.44          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 6        | 0.44          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 6        | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 16       | 0.44          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 16       | 0.44          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 16       | 0.44          |
| (1,107) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 16       | 0.44          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:H   | 1        | 0.44          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:H   | 4        | 0.44          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:H   | 6        | 0.44          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:H   | 7        | 0.44          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:H   | 8        | 0.44          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:H   | 10       | 0.44          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:H   | 12       | 0.44          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:H   | 16       | 0.44          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:H   | 18       | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 1        | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 1        | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 3        | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 3        | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 4        | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 4        | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 6        | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 6        | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 7        | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 7        | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 8        | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 8        | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 10       | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 10       | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 11       | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 11       | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 12       | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 12       | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 15       | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 15       | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 16       | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 16       | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 18       | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 18       | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 20       | 0.44          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 20       | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 1        | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 1        | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 3        | 0.44          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB3 | 3        | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB2 | 4        | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB3 | 4        | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB2 | 6        | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB3 | 6        | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB2 | 7        | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB3 | 7        | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB2 | 8        | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB3 | 8        | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB2 | 10       | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB3 | 10       | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB2 | 11       | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB3 | 11       | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB2 | 12       | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB3 | 12       | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB2 | 15       | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB3 | 15       | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB2 | 16       | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB3 | 16       | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB2 | 18       | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB3 | 18       | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB2 | 20       | 0.44          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HB3 | 20       | 0.44          |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HA  | 2        | 0.44          |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HA  | 3        | 0.44          |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HA  | 9        | 0.44          |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HA  | 11       | 0.44          |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HA  | 13       | 0.44          |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HA  | 15       | 0.44          |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HA  | 20       | 0.44          |
| (2,35)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H  | 11       | 0.43          |
| (2,35)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H  | 11       | 0.43          |
| (2,35)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H  | 11       | 0.43          |
| (2,35)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H  | 11       | 0.43          |
| (2,35)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H  | 11       | 0.43          |
| (2,35)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H  | 11       | 0.43          |
| (2,32)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HG | 4        | 0.43          |
| (2,32)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HG | 4        | 0.43          |
| (2,32)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HG | 4        | 0.43          |
| (2,32)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HG | 4        | 0.43          |
| (2,32)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HG | 4        | 0.43          |
| (2,32)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HG | 4        | 0.43          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,32) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HG   | 8        | 0.43          |
| (2,32) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HG   | 8        | 0.43          |
| (2,32) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HG   | 8        | 0.43          |
| (2,32) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HG   | 8        | 0.43          |
| (2,32) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HG   | 8        | 0.43          |
| (2,32) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HG   | 8        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD11 | 2        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD12 | 2        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD13 | 2        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD11 | 2        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD12 | 2        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD13 | 2        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD11 | 3        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD12 | 3        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD13 | 3        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD11 | 3        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD12 | 3        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD13 | 3        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD11 | 5        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD12 | 5        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD13 | 5        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD11 | 5        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD12 | 5        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD13 | 5        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.43          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 6        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 6        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 6        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 6        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 6        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 6        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 7        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 7        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 7        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 7        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 7        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 7        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 10       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 10       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 10       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 10       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 10       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 10       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 12       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 12       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 12       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.43          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 12       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 12       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 12       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 13       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 13       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 13       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 13       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 13       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 13       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 15       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 15       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 15       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 15       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 15       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 15       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 16       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 16       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 16       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 16       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 16       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 16       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.43          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 17       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 17       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 17       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 17       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 17       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 17       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 18       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 18       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 18       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 18       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 18       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 18       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 19       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 19       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 19       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 19       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 19       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 19       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 20       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 20       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 20       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.43          |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.43          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:12:ILE:HD11 | 20       | 0.43          |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:12:ILE:HD12 | 20       | 0.43          |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:12:ILE:HD13 | 20       | 0.43          |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.43          |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.43          |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.43          |
| (1,742) | 1:A:16:LYS:H   | 1:A:17:LYS:H    | 11       | 0.43          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG2  | 5        | 0.43          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG3  | 5        | 0.43          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG2  | 5        | 0.43          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG3  | 5        | 0.43          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG2  | 7        | 0.43          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG3  | 7        | 0.43          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG2  | 7        | 0.43          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG3  | 7        | 0.43          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD2  | 11       | 0.43          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD3  | 11       | 0.43          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:16:LYS:HE2  | 9        | 0.43          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:16:LYS:HE3  | 9        | 0.43          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:16:LYS:HE2  | 16       | 0.43          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:16:LYS:HE3  | 16       | 0.43          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:16:LYS:HE2  | 17       | 0.43          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:16:LYS:HE3  | 17       | 0.43          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:16:LYS:HE2  | 18       | 0.43          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:16:LYS:HE3  | 18       | 0.43          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:16:LYS:HE2  | 19       | 0.43          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:16:LYS:HE3  | 19       | 0.43          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:16:LYS:HE2  | 20       | 0.43          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:16:LYS:HE3  | 20       | 0.43          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB2  | 4        | 0.43          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB3  | 4        | 0.43          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB2  | 8        | 0.43          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB3  | 8        | 0.43          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H    | 3        | 0.43          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H    | 3        | 0.43          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H    | 9        | 0.43          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H    | 9        | 0.43          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H    | 10       | 0.43          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H    | 10       | 0.43          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H    | 16       | 0.43          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H    | 16       | 0.43          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H    | 18       | 0.43          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H   | 18       | 0.43          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.43          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.43          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HA  | 1        | 0.43          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HA  | 4        | 0.43          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HA  | 5        | 0.43          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HA  | 7        | 0.43          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HA  | 8        | 0.43          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HA  | 19       | 0.43          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:HA  | 20       | 0.43          |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HE  | 3        | 0.43          |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HE  | 10       | 0.43          |
| (1,683) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:15:ARG:HE  | 12       | 0.43          |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HE   | 7        | 0.43          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2 | 1:A:17:LYS:HA  | 1        | 0.43          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3 | 1:A:17:LYS:HA  | 1        | 0.43          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2 | 1:A:17:LYS:HA  | 5        | 0.43          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3 | 1:A:17:LYS:HA  | 5        | 0.43          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2 | 1:A:17:LYS:HA  | 6        | 0.43          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3 | 1:A:17:LYS:HA  | 6        | 0.43          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2 | 1:A:17:LYS:HA  | 9        | 0.43          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3 | 1:A:17:LYS:HA  | 9        | 0.43          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2 | 1:A:17:LYS:HA  | 18       | 0.43          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3 | 1:A:17:LYS:HA  | 18       | 0.43          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2 | 1:A:17:LYS:HA  | 20       | 0.43          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3 | 1:A:17:LYS:HA  | 20       | 0.43          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HD2  | 19       | 0.43          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HD3  | 19       | 0.43          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:14:GLN:HG2 | 4        | 0.43          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:14:GLN:HG3 | 4        | 0.43          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:14:GLN:HG2 | 8        | 0.43          |
| (1,599) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:14:GLN:HG3 | 8        | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HB  | 1        | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HB  | 1        | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HB  | 2        | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HB  | 2        | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HB  | 3        | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HB  | 3        | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HB  | 5        | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HB  | 5        | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HB  | 6        | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HB  | 6        | 0.43          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HB | 7        | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HB | 7        | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HB | 9        | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HB | 9        | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HB | 10       | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HB | 10       | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HB | 11       | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HB | 11       | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HB | 13       | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HB | 13       | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HB | 14       | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HB | 14       | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HB | 16       | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HB | 16       | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HB | 17       | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HB | 17       | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HB | 18       | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HB | 18       | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HB | 20       | 0.43          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HB | 20       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 1        | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 1        | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 2        | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 2        | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 3        | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 3        | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 5        | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 5        | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 6        | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 6        | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 7        | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 7        | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 9        | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 9        | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 10       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 10       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 11       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 11       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 12       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 12       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 13       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 13       | 0.43          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB   | 14       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB   | 14       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB   | 15       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB   | 15       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB   | 16       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB   | 16       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB   | 17       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB   | 17       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB   | 18       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB   | 18       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB   | 19       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB   | 19       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB   | 20       | 0.43          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB   | 20       | 0.43          |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.43          |
| (1,518) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.43          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 2        | 0.43          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 2        | 0.43          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 2        | 0.43          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 19       | 0.43          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 19       | 0.43          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 19       | 0.43          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:9:ARG:HD2   | 6        | 0.43          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:9:ARG:HD3   | 6        | 0.43          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:9:ARG:HD2   | 7        | 0.43          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:9:ARG:HD3   | 7        | 0.43          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:9:ARG:HD2   | 11       | 0.43          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:9:ARG:HD3   | 11       | 0.43          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:9:ARG:HD2   | 12       | 0.43          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:9:ARG:HD3   | 12       | 0.43          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:9:ARG:HD2   | 15       | 0.43          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:9:ARG:HD3   | 15       | 0.43          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:9:ARG:HD2   | 18       | 0.43          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:9:ARG:HD3   | 18       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1  | 1:A:12:ILE:HB   | 1        | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2  | 1:A:12:ILE:HB   | 1        | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1  | 1:A:12:ILE:HB   | 2        | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2  | 1:A:12:ILE:HB   | 2        | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1  | 1:A:12:ILE:HB   | 3        | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2  | 1:A:12:ILE:HB   | 3        | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1  | 1:A:12:ILE:HB   | 5        | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2  | 1:A:12:ILE:HB   | 5        | 0.43          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HB  | 6        | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HB  | 6        | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HB  | 7        | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HB  | 7        | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HB  | 9        | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HB  | 9        | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HB  | 10       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HB  | 10       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HB  | 11       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HB  | 11       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HB  | 12       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HB  | 12       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HB  | 13       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HB  | 13       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HB  | 14       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HB  | 14       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HB  | 15       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HB  | 15       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HB  | 16       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HB  | 16       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HB  | 17       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HB  | 17       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HB  | 18       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HB  | 18       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HB  | 19       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HB  | 19       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HB  | 20       | 0.43          |
| (1,409) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HB  | 20       | 0.43          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 4        | 0.43          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 4        | 0.43          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:10:ASP:HB2 | 8        | 0.43          |
| (1,387) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:10:ASP:HB3 | 8        | 0.43          |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HZ   | 1        | 0.43          |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HZ   | 2        | 0.43          |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HZ   | 3        | 0.43          |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HZ   | 4        | 0.43          |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HZ   | 5        | 0.43          |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HZ   | 6        | 0.43          |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HZ   | 7        | 0.43          |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HZ   | 8        | 0.43          |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HZ   | 9        | 0.43          |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HZ   | 10       | 0.43          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|----------------|----------|---------------|
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HZ   | 11       | 0.43          |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HZ   | 12       | 0.43          |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HZ   | 13       | 0.43          |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HZ   | 14       | 0.43          |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HZ   | 16       | 0.43          |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HZ   | 17       | 0.43          |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HZ   | 18       | 0.43          |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HZ   | 19       | 0.43          |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HZ   | 20       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG2 | 1        | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG3 | 1        | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG2 | 2        | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG3 | 2        | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG2 | 3        | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG3 | 3        | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG2 | 6        | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG3 | 6        | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG2 | 7        | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG3 | 7        | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG2 | 10       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG3 | 10       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG2 | 11       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG3 | 11       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG2 | 12       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG3 | 12       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG2 | 13       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG3 | 13       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG2 | 14       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG3 | 14       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG2 | 16       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG3 | 16       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG2 | 17       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG3 | 17       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG2 | 18       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG3 | 18       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG2 | 19       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG3 | 19       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG2 | 20       | 0.43          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG3 | 20       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG2 | 1        | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG3 | 1        | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:15:ARG:HG2 | 2        | 0.43          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 2        | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2 | 3        | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 3        | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2 | 6        | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 6        | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2 | 7        | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 7        | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2 | 10       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 10       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2 | 11       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 11       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2 | 12       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 12       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2 | 13       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 13       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2 | 14       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 14       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2 | 16       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 16       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2 | 17       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 17       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2 | 18       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 18       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2 | 19       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 19       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2 | 20       | 0.43          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 20       | 0.43          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H   | 11       | 0.43          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H   | 11       | 0.43          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 17       | 0.43          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 17       | 0.43          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 17       | 0.43          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 17       | 0.43          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 17       | 0.43          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 17       | 0.43          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 17       | 0.43          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 17       | 0.43          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 17       | 0.43          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 17       | 0.43          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 17       | 0.43          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 17       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 1        | 0.43          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 1        | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 2        | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 2        | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 3        | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 3        | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 5        | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 5        | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 6        | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 6        | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 7        | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 7        | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 9        | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 9        | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 10       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 10       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 11       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 11       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 12       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 12       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 13       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 13       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 14       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 14       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 16       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 16       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 17       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 17       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 18       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 18       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 19       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 19       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 20       | 0.43          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 20       | 0.43          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 4        | 0.43          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 4        | 0.43          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 8        | 0.43          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 8        | 0.43          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 17       | 0.43          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 17       | 0.43          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 17       | 0.43          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 17       | 0.43          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 17       | 0.43          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 17       | 0.43          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 17       | 0.43          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 17       | 0.43          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 17       | 0.43          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 17       | 0.43          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 17       | 0.43          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 17       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 1        | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 1        | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 1        | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 1        | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 5        | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 5        | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 5        | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 5        | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 6        | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 6        | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 6        | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 6        | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 7        | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 7        | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 7        | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 7        | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 11       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 11       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 11       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 11       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 12       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 12       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 12       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 12       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 13       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 13       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 13       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 13       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 15       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 15       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 15       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 15       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 16       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 16       | 0.43          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 17       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 17       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 17       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 17       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.43          |
| (1,328) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.43          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2 | 15       | 0.43          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 15       | 0.43          |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 4        | 0.43          |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 8        | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 2        | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 2        | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 3        | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 3        | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 5        | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 5        | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 6        | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 6        | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 7        | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 7        | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 9        | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 9        | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 10       | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 10       | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 11       | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 11       | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 13       | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 13       | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 14       | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 14       | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 15       | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 15       | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 16       | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 16       | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 17       | 0.43          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.43          |
| (1,305) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.43          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HG  | 14       | 0.43          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HG  | 14       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 1        | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 1        | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 2        | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 2        | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 3        | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 3        | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 4        | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 4        | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 5        | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 5        | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 6        | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 6        | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 7        | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 7        | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 8        | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 8        | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 9        | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 9        | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 10       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 10       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 11       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 11       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 12       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 12       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 13       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 13       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 14       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 14       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 15       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 15       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 16       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 16       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 17       | 0.43          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 17       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 18       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 18       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 19       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 19       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:7:PHE:HZ  | 20       | 0.43          |
| (1,279) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 20       | 0.43          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 4        | 0.43          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 4        | 0.43          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE1 | 8        | 0.43          |
| (1,272) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HE2 | 8        | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H   | 2        | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H   | 2        | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H   | 2        | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H   | 3        | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H   | 3        | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H   | 3        | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H   | 5        | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H   | 5        | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H   | 5        | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H   | 10       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H   | 10       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H   | 10       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H   | 13       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H   | 13       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H   | 13       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H   | 14       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H   | 14       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H   | 14       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H   | 16       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H   | 16       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H   | 16       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H   | 17       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H   | 17       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H   | 17       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H   | 18       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H   | 18       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H   | 18       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H   | 19       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H   | 19       | 0.43          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H   | 19       | 0.43          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.43          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.43          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 8        | 0.43          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 8        | 0.43          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.43          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.43          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.43          |
| (1,257) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.43          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 9        | 0.43          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 9        | 0.43          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 9        | 0.43          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 9        | 0.43          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 17       | 0.43          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 17       | 0.43          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 17       | 0.43          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 17       | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 1        | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 1        | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 3        | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 3        | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 4        | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 4        | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 6        | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 6        | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 7        | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 7        | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 8        | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 8        | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 10       | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 10       | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 11       | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 11       | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 12       | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 12       | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 15       | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 15       | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 16       | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 16       | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 18       | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 18       | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 20       | 0.43          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 20       | 0.43          |
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ  | 17       | 0.43          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,229) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ  | 17       | 0.43          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H   | 11       | 0.43          |
| (1,228) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H   | 11       | 0.43          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:H   | 11       | 0.43          |
| (1,226) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:H   | 11       | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 2        | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 2        | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 2        | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 2        | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 5        | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 5        | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 5        | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 5        | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 13       | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 13       | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 13       | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 13       | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 17       | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 17       | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 17       | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 17       | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 19       | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 19       | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 19       | 0.43          |
| (1,225) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 19       | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2 | 1        | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB3 | 1        | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2 | 3        | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB3 | 3        | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2 | 4        | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB3 | 4        | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2 | 5        | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB3 | 5        | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2 | 6        | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB3 | 6        | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2 | 7        | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB3 | 7        | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2 | 8        | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB3 | 8        | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2 | 9        | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB3 | 9        | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2 | 10       | 0.43          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB3 | 10       | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2 | 16       | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB3 | 16       | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2 | 18       | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB3 | 18       | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2 | 19       | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB3 | 19       | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2 | 20       | 0.43          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB3 | 20       | 0.43          |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:4:LEU:HG  | 5        | 0.43          |
| (1,22)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:4:LEU:HG  | 19       | 0.43          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 17       | 0.43          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 17       | 0.43          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 17       | 0.43          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 17       | 0.43          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 17       | 0.43          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 17       | 0.43          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 17       | 0.43          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 17       | 0.43          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 17       | 0.43          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 17       | 0.43          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 17       | 0.43          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 17       | 0.43          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 3        | 0.43          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 3        | 0.43          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 5        | 0.43          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 5        | 0.43          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 11       | 0.43          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 11       | 0.43          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 15       | 0.43          |
| (1,140) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 15       | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 2        | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 2        | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 2        | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 2        | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 2        | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 2        | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 11       | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 11       | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 11       | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 11       | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 11       | 0.43          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 11       | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 13       | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 13       | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 13       | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 13       | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 13       | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 13       | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 17       | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 17       | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 17       | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 17       | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 17       | 0.43          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 17       | 0.43          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:5:SER:H   | 2        | 0.43          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:5:SER:H   | 2        | 0.43          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:5:SER:H   | 9        | 0.43          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:5:SER:H   | 9        | 0.43          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:5:SER:H   | 15       | 0.43          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:5:SER:H   | 15       | 0.43          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:5:SER:H   | 17       | 0.43          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:5:SER:H   | 17       | 0.43          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:5:SER:H   | 20       | 0.43          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:5:SER:H   | 20       | 0.43          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG2 | 13       | 0.43          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG3 | 13       | 0.43          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:H   | 3        | 0.43          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:H   | 11       | 0.43          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:H   | 15       | 0.43          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:H   | 19       | 0.43          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:H   | 20       | 0.43          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 2        | 0.43          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 2        | 0.43          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 13       | 0.43          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 13       | 0.43          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 17       | 0.43          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 17       | 0.43          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 2        | 0.43          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 2        | 0.43          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 13       | 0.43          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 13       | 0.43          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 17       | 0.43          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 17       | 0.43          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HA    | 14       | 0.43          |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:HA    | 17       | 0.43          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:3:ARG:HG2   | 13       | 0.43          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:3:ARG:HG3   | 13       | 0.43          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2  | 11       | 0.42          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3  | 11       | 0.42          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2  | 11       | 0.42          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3  | 11       | 0.42          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2  | 11       | 0.42          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3  | 11       | 0.42          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2  | 11       | 0.42          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3  | 11       | 0.42          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2  | 11       | 0.42          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3  | 11       | 0.42          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2  | 11       | 0.42          |
| (2,34)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3  | 11       | 0.42          |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD11 | 11       | 0.42          |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD12 | 11       | 0.42          |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD13 | 11       | 0.42          |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.42          |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.42          |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.42          |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD11 | 11       | 0.42          |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD12 | 11       | 0.42          |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD13 | 11       | 0.42          |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.42          |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.42          |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.42          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HA   | 4        | 0.42          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HA   | 8        | 0.42          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:16:LYS:HE2  | 15       | 0.42          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:16:LYS:HE3  | 15       | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HB2  | 2        | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HB3  | 2        | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HB2  | 3        | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HB3  | 3        | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HB2  | 6        | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HB3  | 6        | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HB2  | 9        | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HB3  | 9        | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HB2  | 10       | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HB3  | 10       | 0.42          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB2 | 13       | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB3 | 13       | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB2 | 14       | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB3 | 14       | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB2 | 16       | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB3 | 16       | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB2 | 17       | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB3 | 17       | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB2 | 18       | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB3 | 18       | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB2 | 20       | 0.42          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB3 | 20       | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H   | 1        | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H   | 1        | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H   | 2        | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H   | 2        | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H   | 6        | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H   | 6        | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H   | 7        | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H   | 7        | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H   | 12       | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H   | 12       | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H   | 13       | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H   | 13       | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H   | 14       | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H   | 14       | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H   | 17       | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H   | 17       | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.42          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.42          |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HE   | 4        | 0.42          |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HE   | 8        | 0.42          |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HE   | 13       | 0.42          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2 | 1:A:17:LYS:HA  | 7        | 0.42          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3 | 1:A:17:LYS:HA  | 7        | 0.42          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2 | 1:A:17:LYS:HA  | 12       | 0.42          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3 | 1:A:17:LYS:HA  | 12       | 0.42          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2 | 1:A:17:LYS:HA  | 19       | 0.42          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3 | 1:A:17:LYS:HA  | 19       | 0.42          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:3:ARG:HD2  | 2        | 0.42          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD3   | 2        | 0.42          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD2   | 12       | 0.42          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD3   | 12       | 0.42          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD2   | 17       | 0.42          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD3   | 17       | 0.42          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.42          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.42          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.42          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.42          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.42          |
| (1,598) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.42          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA   | 4        | 0.42          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA   | 4        | 0.42          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA   | 4        | 0.42          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HA   | 8        | 0.42          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HA   | 8        | 0.42          |
| (1,590) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HA   | 8        | 0.42          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HB   | 12       | 0.42          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HB   | 12       | 0.42          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HB   | 15       | 0.42          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HB   | 15       | 0.42          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HB   | 19       | 0.42          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HB   | 19       | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.42          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.42          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.42          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:13:LEU:HG   | 4        | 0.42          |
| (1,508) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:13:LEU:HG   | 8        | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1        | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1        | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1        | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 3        | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 3        | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 3        | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 5        | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 5        | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 5        | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 6        | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 6        | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 6        | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 7        | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 7        | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 7        | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 9        | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 9        | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 9        | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 10       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 10       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 10       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 11       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 11       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 11       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 12       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 12       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 12       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 13       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 13       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 13       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 14       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 14       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 14       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 15       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 15       | 0.42          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 15       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 16       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 16       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 16       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 17       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 17       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 17       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 18       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 18       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 18       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 20       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 20       | 0.42          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 20       | 0.42          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 4        | 0.42          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 4        | 0.42          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 8        | 0.42          |
| (1,478) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 8        | 0.42          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 4        | 0.42          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 4        | 0.42          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB2  | 8        | 0.42          |
| (1,477) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HB3  | 8        | 0.42          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 4        | 0.42          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 4        | 0.42          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 4        | 0.42          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 4        | 0.42          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 4        | 0.42          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 4        | 0.42          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 8        | 0.42          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 8        | 0.42          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 8        | 0.42          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 8        | 0.42          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 8        | 0.42          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 8        | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2  | 1        | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3  | 1        | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2  | 2        | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3  | 2        | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2  | 3        | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3  | 3        | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2  | 4        | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3  | 4        | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2  | 5        | 0.42          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 5        | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 7        | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 7        | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 8        | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 8        | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 10       | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 10       | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 14       | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 14       | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 15       | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 15       | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 16       | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 16       | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 17       | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 17       | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 19       | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 19       | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 20       | 0.42          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 20       | 0.42          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 1        | 0.42          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 1        | 0.42          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 9        | 0.42          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 9        | 0.42          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD2  | 4        | 0.42          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD3  | 4        | 0.42          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD2  | 8        | 0.42          |
| (1,416) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HD3  | 8        | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 1        | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 1        | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 2        | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 2        | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 3        | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 3        | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 4        | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 4        | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 5        | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 5        | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 6        | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 6        | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 7        | 0.42          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 7        | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 8        | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 8        | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 9        | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 9        | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 10       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 10       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 11       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 11       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 12       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 12       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 13       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 13       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 14       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 14       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 15       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 15       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 16       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 16       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 17       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 17       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 18       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 18       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 19       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 19       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 20       | 0.42          |
| (1,381) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 20       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 1        | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 1        | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 2        | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 2        | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 3        | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 3        | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 4        | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 4        | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 5        | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 5        | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 6        | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 6        | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 7        | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ | 7        | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ | 8        | 0.42          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 8        | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 9        | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 9        | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 10       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 10       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 11       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 11       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 12       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 12       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 13       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 13       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 14       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 14       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 15       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 15       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 16       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 16       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 17       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 17       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 18       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 18       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 19       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 19       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 20       | 0.42          |
| (1,378) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:HZ   | 20       | 0.42          |
| (1,375) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HZ   | 15       | 0.42          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2 | 5        | 0.42          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 5        | 0.42          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2 | 9        | 0.42          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 9        | 0.42          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H    | 17       | 0.42          |
| (1,37)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H    | 17       | 0.42          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2 | 5        | 0.42          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 5        | 0.42          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2 | 9        | 0.42          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 9        | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H   | 1        | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H   | 1        | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H   | 2        | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H   | 2        | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H   | 3        | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H   | 3        | 0.42          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 5        | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H    | 5        | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 6        | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H    | 6        | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 7        | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H    | 7        | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 9        | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H    | 9        | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 10       | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H    | 10       | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 12       | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H    | 12       | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 13       | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H    | 13       | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 14       | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H    | 14       | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 15       | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H    | 15       | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 16       | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H    | 16       | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 17       | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H    | 17       | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 18       | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H    | 18       | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 19       | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H    | 19       | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.42          |
| (1,361) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.42          |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB   | 3        | 0.42          |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB   | 11       | 0.42          |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB   | 12       | 0.42          |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB   | 14       | 0.42          |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB   | 20       | 0.42          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 4        | 0.42          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 4        | 0.42          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 4        | 0.42          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD11 | 8        | 0.42          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD12 | 8        | 0.42          |
| (1,349) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HD13 | 8        | 0.42          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:H     | 17       | 0.42          |
| (1,34)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:H     | 17       | 0.42          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2  | 4        | 0.42          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 4        | 0.42          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 4        | 0.42          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 8        | 0.42          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 12       | 0.42          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HG   | 5        | 0.42          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HG   | 5        | 0.42          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HG   | 19       | 0.42          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HG   | 19       | 0.42          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H    | 4        | 0.42          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H    | 4        | 0.42          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H    | 4        | 0.42          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H    | 8        | 0.42          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H    | 8        | 0.42          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H    | 8        | 0.42          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:H    | 9        | 0.42          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:H    | 9        | 0.42          |
| (1,266) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:H    | 9        | 0.42          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2  | 1        | 0.42          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3  | 1        | 0.42          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2  | 1        | 0.42          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3  | 1        | 0.42          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H    | 2        | 0.42          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H    | 2        | 0.42          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H    | 5        | 0.42          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H    | 5        | 0.42          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H    | 13       | 0.42          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H    | 13       | 0.42          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H    | 14       | 0.42          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H    | 14       | 0.42          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H    | 17       | 0.42          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H    | 17       | 0.42          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H    | 19       | 0.42          |
| (1,236) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H    | 19       | 0.42          |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HZ   | 4        | 0.42          |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HZ   | 8        | 0.42          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2  | 2        | 0.42          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB3  | 2        | 0.42          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2  | 13       | 0.42          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB3  | 13       | 0.42          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2  | 14       | 0.42          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB3  | 14       | 0.42          |
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB2  | 17       | 0.42          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,220) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HB3 | 17       | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 2        | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 2        | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 2        | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 2        | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 2        | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 2        | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 5        | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 5        | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 5        | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 5        | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 5        | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 5        | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 13       | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 13       | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 13       | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 13       | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 13       | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 13       | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 14       | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 14       | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 14       | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 14       | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 14       | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 14       | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 19       | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 19       | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 19       | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 19       | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 19       | 0.42          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 19       | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 2        | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 2        | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 2        | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 2        | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 2        | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 2        | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 5        | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 5        | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 5        | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 5        | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 5        | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 5        | 0.42          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:6:ALA:HB3 | 5        | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:6:ALA:HB1 | 13       | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:6:ALA:HB2 | 13       | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:6:ALA:HB3 | 13       | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:6:ALA:HB1 | 13       | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:6:ALA:HB2 | 13       | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:6:ALA:HB3 | 13       | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:6:ALA:HB1 | 14       | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:6:ALA:HB2 | 14       | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:6:ALA:HB3 | 14       | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:6:ALA:HB1 | 14       | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:6:ALA:HB2 | 14       | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:6:ALA:HB3 | 14       | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:6:ALA:HB1 | 19       | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:6:ALA:HB2 | 19       | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:6:ALA:HB3 | 19       | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:6:ALA:HB1 | 19       | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:6:ALA:HB2 | 19       | 0.42          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:6:ALA:HB3 | 19       | 0.42          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE1 | 1        | 0.42          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE2 | 1        | 0.42          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE1 | 3        | 0.42          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE2 | 3        | 0.42          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE1 | 6        | 0.42          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE2 | 6        | 0.42          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE1 | 7        | 0.42          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE2 | 7        | 0.42          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE1 | 10       | 0.42          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE2 | 10       | 0.42          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE1 | 15       | 0.42          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE2 | 15       | 0.42          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE1 | 16       | 0.42          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE2 | 16       | 0.42          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE1 | 18       | 0.42          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE2 | 18       | 0.42          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE1 | 20       | 0.42          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE2 | 20       | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H   | 2        | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H   | 2        | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H   | 2        | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H   | 2        | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H   | 2        | 0.42          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2      | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-------------|----------|---------------|
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 2        | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 5        | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 5        | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 5        | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 5        | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 5        | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 5        | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 9        | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 9        | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 9        | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 9        | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 9        | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 9        | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 13       | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 13       | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 13       | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 13       | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 13       | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 13       | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 14       | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 14       | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 14       | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 14       | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 14       | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 14       | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 19       | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 19       | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 19       | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 19       | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 19       | 0.42          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 19       | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 2        | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 2        | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 2        | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 2        | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 2        | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 2        | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 5        | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 5        | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 5        | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 5        | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 5        | 0.42          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|--------------|----------|---------------|
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H  | 5        | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H  | 9        | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H  | 9        | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H  | 9        | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H  | 9        | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H  | 9        | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H  | 9        | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H  | 13       | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H  | 13       | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H  | 13       | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H  | 13       | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H  | 13       | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H  | 13       | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H  | 14       | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H  | 14       | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H  | 14       | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H  | 14       | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H  | 14       | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H  | 14       | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H  | 19       | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H  | 19       | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H  | 19       | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H  | 19       | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H  | 19       | 0.42          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H  | 19       | 0.42          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:3:ARG:HA | 6        | 0.42          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:3:ARG:HA | 6        | 0.42          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:3:ARG:HA | 11       | 0.42          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:3:ARG:HA | 11       | 0.42          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:3:ARG:HA | 12       | 0.42          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:3:ARG:HA | 12       | 0.42          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:3:ARG:HA | 15       | 0.42          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:3:ARG:HA | 15       | 0.42          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:6:ALA:H  | 1        | 0.42          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:6:ALA:H  | 1        | 0.42          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:6:ALA:H  | 3        | 0.42          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:6:ALA:H  | 3        | 0.42          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:6:ALA:H  | 5        | 0.42          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:6:ALA:H  | 5        | 0.42          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:6:ALA:H  | 11       | 0.42          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:6:ALA:H  | 11       | 0.42          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:6:ALA:H  | 14       | 0.42          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:6:ALA:H   | 14       | 0.42          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:6:ALA:H   | 15       | 0.42          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:6:ALA:H   | 15       | 0.42          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:6:ALA:H   | 19       | 0.42          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:6:ALA:H   | 19       | 0.42          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:6:ALA:H   | 20       | 0.42          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:6:ALA:H   | 20       | 0.42          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 3        | 0.42          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 3        | 0.42          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 3        | 0.42          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 3        | 0.42          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 3        | 0.42          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 3        | 0.42          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 12       | 0.42          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 12       | 0.42          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 12       | 0.42          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 12       | 0.42          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 12       | 0.42          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 12       | 0.42          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2 | 1:A:5:SER:H   | 19       | 0.42          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3 | 1:A:5:SER:H   | 19       | 0.42          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG2 | 2        | 0.42          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG3 | 2        | 0.42          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:H   | 2        | 0.42          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:H   | 13       | 0.42          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:H   | 14       | 0.42          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:H   | 17       | 0.42          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 5        | 0.42          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 5        | 0.42          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 14       | 0.42          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 14       | 0.42          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 19       | 0.42          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 19       | 0.42          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 5        | 0.42          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 5        | 0.42          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 14       | 0.42          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 14       | 0.42          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2 | 19       | 0.42          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3 | 19       | 0.42          |
| (1,103) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HA  | 5        | 0.42          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG2 | 2        | 0.42          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG3 | 2        | 0.42          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2 | 3        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3 | 3        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2 | 3        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3 | 3        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2 | 3        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3 | 3        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2 | 3        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3 | 3        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2 | 3        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3 | 3        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2 | 3        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3 | 3        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2 | 6        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3 | 6        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2 | 6        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3 | 6        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2 | 6        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3 | 6        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2 | 6        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3 | 6        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2 | 6        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3 | 6        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2 | 6        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3 | 6        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2 | 7        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3 | 7        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2 | 7        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3 | 7        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2 | 7        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3 | 7        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2 | 7        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3 | 7        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2 | 7        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3 | 7        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2 | 7        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3 | 7        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2 | 9        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3 | 9        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2 | 9        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3 | 9        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2 | 9        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3 | 9        | 0.41          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2 | 9        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3 | 9        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2 | 9        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3 | 9        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2 | 9        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3 | 9        | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2 | 13       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3 | 13       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2 | 13       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3 | 13       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2 | 13       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3 | 13       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2 | 13       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3 | 13       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2 | 13       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3 | 13       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2 | 13       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3 | 13       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2 | 14       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3 | 14       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2 | 14       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3 | 14       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2 | 14       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3 | 14       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2 | 14       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3 | 14       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2 | 14       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3 | 14       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2 | 14       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3 | 14       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2 | 18       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3 | 18       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2 | 18       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3 | 18       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2 | 18       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3 | 18       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2 | 18       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3 | 18       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2 | 18       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3 | 18       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2 | 18       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3 | 18       | 0.41          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2 | 20       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3 | 20       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2 | 20       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3 | 20       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2 | 20       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3 | 20       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2 | 20       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3 | 20       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2 | 20       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3 | 20       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2 | 20       | 0.41          |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3 | 20       | 0.41          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.41          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.41          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.41          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.41          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.41          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 4        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 4        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 4        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 4        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 4        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 4        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 4        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 4        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 4        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 4        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 4        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 4        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 8        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 8        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 8        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 8        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 8        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 8        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 8        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 8        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 8        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 8        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 8        | 0.41          |
| (2,34) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 8        | 0.41          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD11 | 4        | 0.41          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD12 | 4        | 0.41          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD13 | 4        | 0.41          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.41          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.41          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.41          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD11 | 8        | 0.41          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD12 | 8        | 0.41          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD13 | 8        | 0.41          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.41          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.41          |
| (2,1)   | 1:A:7:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.41          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG2  | 1        | 0.41          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG3  | 1        | 0.41          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG2  | 1        | 0.41          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG3  | 1        | 0.41          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG2  | 19       | 0.41          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2 | 1:A:17:LYS:HG3  | 19       | 0.41          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG2  | 19       | 0.41          |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3 | 1:A:17:LYS:HG3  | 19       | 0.41          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HA   | 1        | 0.41          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HA   | 2        | 0.41          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HA   | 3        | 0.41          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HA   | 5        | 0.41          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HA   | 6        | 0.41          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HA   | 7        | 0.41          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HA   | 9        | 0.41          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HA   | 10       | 0.41          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HA   | 12       | 0.41          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HA   | 13       | 0.41          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HA   | 14       | 0.41          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HA   | 16       | 0.41          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HA   | 17       | 0.41          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HA   | 18       | 0.41          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HA   | 19       | 0.41          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HA   | 20       | 0.41          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB2  | 1        | 0.41          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB3  | 1        | 0.41          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB2  | 5        | 0.41          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB3  | 5        | 0.41          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB2  | 7        | 0.41          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HB3  | 7        | 0.41          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HB2  | 15       | 0.41          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HB3  | 15       | 0.41          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HB2  | 19       | 0.41          |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HB3  | 19       | 0.41          |
| (1,705) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:16:LYS:HA   | 11       | 0.41          |
| (1,68)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HE    | 10       | 0.41          |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.41          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD2   | 1        | 0.41          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD3   | 1        | 0.41          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD2   | 4        | 0.41          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD3   | 4        | 0.41          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD2   | 6        | 0.41          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD3   | 6        | 0.41          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD2   | 7        | 0.41          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD3   | 7        | 0.41          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD2   | 8        | 0.41          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD3   | 8        | 0.41          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD2   | 10       | 0.41          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD3   | 10       | 0.41          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD2   | 13       | 0.41          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD3   | 13       | 0.41          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD2   | 16       | 0.41          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD3   | 16       | 0.41          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD2   | 18       | 0.41          |
| (1,67)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:3:ARG:HD3   | 18       | 0.41          |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H    | 11       | 0.41          |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H    | 11       | 0.41          |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H    | 11       | 0.41          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:H    | 4        | 0.41          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:H    | 4        | 0.41          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:H    | 8        | 0.41          |
| (1,531) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:H    | 8        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.41          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.41          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.41          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.41          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.41          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.41          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.41          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB   | 4        | 0.41          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB   | 4        | 0.41          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB   | 8        | 0.41          |
| (1,497) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB   | 8        | 0.41          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:11:PHE:HB2  | 4        | 0.41          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:11:PHE:HB3  | 4        | 0.41          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB2  | 9        | 0.41          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB3  | 9        | 0.41          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB2  | 11       | 0.41          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB3  | 11       | 0.41          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB2  | 12       | 0.41          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB3  | 12       | 0.41          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB2  | 13       | 0.41          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB3  | 13       | 0.41          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB2  | 18       | 0.41          |
| (1,446) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB3  | 18       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 2        | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 2        | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 3        | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 3        | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 4        | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 4        | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 5        | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 5        | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 6        | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 6        | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 7        | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 7        | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 8        | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 8        | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 10       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 10       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 11       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 11       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 12       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 12       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 13       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 13       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 14       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 14       | 0.41          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 15       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 15       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 16       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 16       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 17       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 17       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 18       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 18       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 19       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 19       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 20       | 0.41          |
| (1,434) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 20       | 0.41          |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 1        | 0.41          |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 1        | 0.41          |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.41          |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.41          |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 12       | 0.41          |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 12       | 0.41          |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 16       | 0.41          |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 16       | 0.41          |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 20       | 0.41          |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 20       | 0.41          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2 | 15       | 0.41          |
| (1,370) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 15       | 0.41          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG2 | 15       | 0.41          |
| (1,369) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:15:ARG:HG3 | 15       | 0.41          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 9        | 0.41          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 9        | 0.41          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 9        | 0.41          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 9        | 0.41          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 10       | 0.41          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 10       | 0.41          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 10       | 0.41          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 10       | 0.41          |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB  | 1        | 0.41          |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB  | 2        | 0.41          |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB  | 5        | 0.41          |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB  | 6        | 0.41          |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB  | 7        | 0.41          |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB  | 9        | 0.41          |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB  | 10       | 0.41          |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB  | 13       | 0.41          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB  | 15       | 0.41          |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB  | 16       | 0.41          |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB  | 17       | 0.41          |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB  | 18       | 0.41          |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB  | 19       | 0.41          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 4        | 0.41          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 4        | 0.41          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 8        | 0.41          |
| (1,342) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 8        | 0.41          |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 4        | 0.41          |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 4        | 0.41          |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 8        | 0.41          |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 8        | 0.41          |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 4        | 0.41          |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 4        | 0.41          |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 8        | 0.41          |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 8        | 0.41          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB2 | 8        | 0.41          |
| (1,323) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:HB3 | 8        | 0.41          |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 1        | 0.41          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 1        | 0.41          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 2        | 0.41          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 3        | 0.41          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 5        | 0.41          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 6        | 0.41          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 7        | 0.41          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 9        | 0.41          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 10       | 0.41          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 11       | 0.41          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 13       | 0.41          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 14       | 0.41          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 15       | 0.41          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 16       | 0.41          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 17       | 0.41          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 18       | 0.41          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 19       | 0.41          |
| (1,308) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:H    | 20       | 0.41          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HG   | 2        | 0.41          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HG   | 2        | 0.41          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HG   | 13       | 0.41          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HG   | 13       | 0.41          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H   | 4        | 0.41          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 4        | 0.41          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 4        | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 4        | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 4        | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 4        | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 4        | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 4        | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 4        | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 8        | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 8        | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 8        | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 8        | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 8        | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 8        | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 11       | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 11       | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 11       | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 11       | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 11       | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 11       | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 14       | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 14       | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 14       | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 14       | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 14       | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 14       | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 15       | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 15       | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 15       | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 15       | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 15       | 0.41          |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 15       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 2        | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 2        | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 2        | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 2        | 0.41          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 2        | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 2        | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.41          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.41          |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 3        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 3        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 3        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 3        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 4        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 4        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 4        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 4        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 6        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 6        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 6        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 6        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 7        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 7        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 7        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 7        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 8        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 8        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 8        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 8        | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 10       | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 10       | 0.41          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HB2 | 10       | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HB3 | 10       | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HB2 | 12       | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HB3 | 12       | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HB2 | 12       | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HB3 | 12       | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HB2 | 15       | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HB3 | 15       | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HB2 | 15       | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HB3 | 15       | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HB2 | 16       | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HB3 | 16       | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HB2 | 16       | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HB3 | 16       | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HB2 | 20       | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HB3 | 20       | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HB2 | 20       | 0.41          |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HB3 | 20       | 0.41          |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA   | 1:A:7:PHE:HZ  | 9        | 0.41          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE1 | 4        | 0.41          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE2 | 4        | 0.41          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE1 | 8        | 0.41          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE2 | 8        | 0.41          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE1 | 11       | 0.41          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE2 | 11       | 0.41          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE1 | 12       | 0.41          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE2 | 12       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H   | 1        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H   | 1        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H   | 1        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H   | 1        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H   | 1        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H   | 1        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H   | 3        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H   | 3        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H   | 3        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H   | 3        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H   | 3        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H   | 3        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H   | 4        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H   | 4        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H   | 4        | 0.41          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2      | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-------------|----------|---------------|
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 4        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 4        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 4        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 6        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 6        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 6        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 6        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 6        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 6        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 7        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 7        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 7        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 7        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 7        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 7        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 8        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 8        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 8        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 8        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 8        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 8        | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 10       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 10       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 10       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 10       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 10       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 10       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 11       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 11       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 11       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 11       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 11       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 11       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 12       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 12       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 12       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 12       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 12       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 12       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 15       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 15       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 15       | 0.41          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2      | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-------------|----------|---------------|
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 15       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 15       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 15       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 16       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 16       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 16       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 16       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 16       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 16       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 17       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 17       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 17       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 17       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 17       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 17       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 18       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 18       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 18       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 18       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 18       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 18       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 20       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 20       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 20       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 20       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 20       | 0.41          |
| (1,181) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 20       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 1        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 1        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 1        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 1        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 1        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 1        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 3        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 3        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 3        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 3        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 3        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 3        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 4        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 4        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 4        | 0.41          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2      | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-------------|----------|---------------|
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 4        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 4        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 4        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 6        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 6        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 6        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 6        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 6        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 6        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 7        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 7        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 7        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 7        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 7        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 7        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 8        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 8        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 8        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 8        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 8        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 8        | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 10       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 10       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 10       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 10       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 10       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 10       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 11       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 11       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 11       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 11       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 11       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 11       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 12       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 12       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 12       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H | 12       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H | 12       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H | 12       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H | 15       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H | 15       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H | 15       | 0.41          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|--------------|----------|---------------|
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H  | 15       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H  | 15       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H  | 15       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H  | 16       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H  | 16       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H  | 16       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H  | 16       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H  | 16       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H  | 16       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H  | 17       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H  | 17       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H  | 17       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H  | 17       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H  | 17       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H  | 17       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H  | 18       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H  | 18       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H  | 18       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H  | 18       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H  | 18       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H  | 18       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:H  | 20       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:H  | 20       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:H  | 20       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:H  | 20       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:H  | 20       | 0.41          |
| (1,176) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:H  | 20       | 0.41          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:3:ARG:HA | 3        | 0.41          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:3:ARG:HA | 3        | 0.41          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:3:ARG:HA | 4        | 0.41          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:3:ARG:HA | 4        | 0.41          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:3:ARG:HA | 7        | 0.41          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:3:ARG:HA | 7        | 0.41          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:3:ARG:HA | 8        | 0.41          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:3:ARG:HA | 8        | 0.41          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:3:ARG:HA | 10       | 0.41          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:3:ARG:HA | 10       | 0.41          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:3:ARG:HA | 16       | 0.41          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:3:ARG:HA | 16       | 0.41          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:3:ARG:HA | 18       | 0.41          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:3:ARG:HA | 18       | 0.41          |
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:3:ARG:HA | 20       | 0.41          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,13)  | 1:A:2:MET:HB3   | 1:A:3:ARG:HA   | 20       | 0.41          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2   | 1:A:6:ALA:H    | 2        | 0.41          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3   | 1:A:6:ALA:H    | 2        | 0.41          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2   | 1:A:6:ALA:H    | 6        | 0.41          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3   | 1:A:6:ALA:H    | 6        | 0.41          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2   | 1:A:6:ALA:H    | 7        | 0.41          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3   | 1:A:6:ALA:H    | 7        | 0.41          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2   | 1:A:6:ALA:H    | 8        | 0.41          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3   | 1:A:6:ALA:H    | 8        | 0.41          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2   | 1:A:6:ALA:H    | 12       | 0.41          |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3   | 1:A:6:ALA:H    | 12       | 0.41          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2   | 1:A:5:SER:H    | 5        | 0.41          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3   | 1:A:5:SER:H    | 5        | 0.41          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG2   | 1:A:5:SER:H    | 14       | 0.41          |
| (1,111) | 1:A:3:ARG:HG3   | 1:A:5:SER:H    | 14       | 0.41          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:H    | 5        | 0.41          |
| (1,106) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:5:SER:H    | 9        | 0.41          |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2 | 1        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3 | 1        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2 | 1        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3 | 1        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2 | 1        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3 | 1        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2 | 1        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3 | 1        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2 | 1        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3 | 1        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2 | 1        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3 | 1        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2 | 2        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3 | 2        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2 | 2        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3 | 2        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2 | 2        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3 | 2        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2 | 2        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3 | 2        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2 | 2        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3 | 2        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2 | 2        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3 | 2        | 0.4           |
| (2,40)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2 | 5        | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3 | 5        | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2 | 5        | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3 | 5        | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2 | 5        | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3 | 5        | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2 | 5        | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3 | 5        | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2 | 5        | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3 | 5        | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2 | 5        | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3 | 5        | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2 | 10       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3 | 10       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2 | 10       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3 | 10       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2 | 10       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3 | 10       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2 | 10       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3 | 10       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2 | 10       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3 | 10       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2 | 10       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3 | 10       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2 | 12       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3 | 12       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2 | 12       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3 | 12       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2 | 12       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3 | 12       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2 | 12       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3 | 12       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2 | 12       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3 | 12       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2 | 12       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3 | 12       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2 | 16       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3 | 16       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2 | 16       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3 | 16       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2 | 16       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3 | 16       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2 | 16       | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3  | 16       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2  | 16       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3  | 16       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2  | 16       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3  | 16       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2  | 17       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3  | 17       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2  | 17       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3  | 17       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2  | 17       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3  | 17       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2  | 17       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3  | 17       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2  | 17       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3  | 17       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2  | 17       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3  | 17       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB2  | 19       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HB3  | 19       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB2  | 19       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HB3  | 19       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB2  | 19       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HB3  | 19       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB2  | 19       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HB3  | 19       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB2  | 19       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HB3  | 19       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB2  | 19       | 0.4           |
| (2,40) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HB3  | 19       | 0.4           |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD11 | 4        | 0.4           |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD12 | 4        | 0.4           |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD13 | 4        | 0.4           |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.4           |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.4           |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.4           |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD11 | 4        | 0.4           |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD12 | 4        | 0.4           |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD13 | 4        | 0.4           |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.4           |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.4           |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.4           |
| (2,14) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD11 | 8        | 0.4           |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD12 | 8        | 0.4           |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HD13 | 8        | 0.4           |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.4           |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.4           |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.4           |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD11 | 8        | 0.4           |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD12 | 8        | 0.4           |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HD13 | 8        | 0.4           |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.4           |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.4           |
| (2,14)  | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.4           |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG    | 2        | 0.4           |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG    | 5        | 0.4           |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG    | 19       | 0.4           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HG2  | 12       | 0.4           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HG3  | 12       | 0.4           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HG2  | 12       | 0.4           |
| (1,740) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HG3  | 12       | 0.4           |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2  | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.4           |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3  | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.4           |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:16:LYS:HE2  | 4        | 0.4           |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:16:LYS:HE3  | 4        | 0.4           |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:16:LYS:HE2  | 8        | 0.4           |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:16:LYS:HE3  | 8        | 0.4           |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HB2  | 12       | 0.4           |
| (1,717) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HB3  | 12       | 0.4           |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:16:LYS:H    | 15       | 0.4           |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:16:LYS:H    | 15       | 0.4           |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2  | 15       | 0.4           |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3  | 15       | 0.4           |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2  | 15       | 0.4           |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3  | 15       | 0.4           |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2  | 15       | 0.4           |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3  | 15       | 0.4           |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2  | 15       | 0.4           |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3  | 15       | 0.4           |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2  | 15       | 0.4           |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3  | 15       | 0.4           |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2  | 15       | 0.4           |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3  | 15       | 0.4           |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2  | 15       | 0.4           |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3  | 15       | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 15       | 0.4           |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 15       | 0.4           |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 15       | 0.4           |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 15       | 0.4           |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 15       | 0.4           |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 15       | 0.4           |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 15       | 0.4           |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 15       | 0.4           |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 15       | 0.4           |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 15       | 0.4           |
| (1,630) | 1:A:13:LEU:HB2  | 1:A:14:GLN:HG2 | 4        | 0.4           |
| (1,630) | 1:A:13:LEU:HB2  | 1:A:14:GLN:HG3 | 4        | 0.4           |
| (1,630) | 1:A:13:LEU:HB3  | 1:A:14:GLN:HG2 | 4        | 0.4           |
| (1,630) | 1:A:13:LEU:HB3  | 1:A:14:GLN:HG3 | 4        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H   | 1        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H   | 1        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H   | 1        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H   | 2        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H   | 2        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H   | 2        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H   | 3        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H   | 3        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H   | 3        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H   | 5        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H   | 5        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H   | 5        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H   | 6        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H   | 6        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H   | 6        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H   | 7        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H   | 7        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H   | 7        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H   | 9        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H   | 9        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H   | 9        | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H   | 10       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H   | 10       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H   | 10       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H   | 12       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H   | 12       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H   | 12       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H   | 13       | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H    | 13       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H    | 13       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H    | 14       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H    | 14       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H    | 14       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H    | 16       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H    | 16       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H    | 16       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H    | 17       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H    | 17       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H    | 17       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H    | 18       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H    | 18       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H    | 18       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H    | 19       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H    | 19       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H    | 19       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H    | 20       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H    | 20       | 0.4           |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H    | 20       | 0.4           |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:14:GLN:HA   | 11       | 0.4           |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:H    | 1        | 0.4           |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:H    | 2        | 0.4           |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:H    | 3        | 0.4           |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:H    | 5        | 0.4           |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:H    | 6        | 0.4           |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:H    | 7        | 0.4           |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:H    | 9        | 0.4           |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:H    | 10       | 0.4           |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:H    | 11       | 0.4           |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:H    | 12       | 0.4           |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:H    | 13       | 0.4           |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:H    | 14       | 0.4           |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:H    | 16       | 0.4           |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:H    | 17       | 0.4           |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:H    | 18       | 0.4           |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:H    | 19       | 0.4           |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:H    | 20       | 0.4           |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.4           |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.4           |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.4           |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.4           |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.4           |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.4           |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.4           |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.4           |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.4           |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.4           |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.4           |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 9        | 0.4           |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 9        | 0.4           |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 9        | 0.4           |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 9        | 0.4           |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 9        | 0.4           |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 9        | 0.4           |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB2  | 8        | 0.4           |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB3  | 8        | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2  | 2        | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3  | 2        | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2  | 3        | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3  | 3        | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2  | 4        | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3  | 4        | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2  | 5        | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3  | 5        | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2  | 7        | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3  | 7        | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2  | 8        | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3  | 8        | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2  | 9        | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3  | 9        | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2  | 10       | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3  | 10       | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2  | 11       | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3  | 11       | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2  | 13       | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3  | 13       | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2  | 14       | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3  | 14       | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2  | 15       | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3  | 15       | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2  | 17       | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3  | 17       | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 18       | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 18       | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 19       | 0.4           |
| (1,405) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 19       | 0.4           |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 1        | 0.4           |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 1        | 0.4           |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 1        | 0.4           |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 1        | 0.4           |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 12       | 0.4           |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 12       | 0.4           |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 12       | 0.4           |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 12       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 1        | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 1        | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 2        | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 2        | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 3        | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 3        | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 4        | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 4        | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 5        | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 5        | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 7        | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 7        | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 8        | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 8        | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 9        | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 9        | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 10       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 10       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 11       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 11       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 12       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 12       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 13       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 13       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 14       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 14       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 15       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 15       | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|----------------|----------|---------------|
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 16       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 16       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 17       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 17       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 18       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 18       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 19       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 19       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 20       | 0.4           |
| (1,395) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 20       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 1        | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 1        | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 2        | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 2        | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 3        | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 3        | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 4        | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 4        | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 5        | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 5        | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 7        | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 7        | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 8        | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 8        | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 9        | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 9        | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 10       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 10       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 11       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 11       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 12       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 12       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 13       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 13       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 14       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 14       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 15       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 15       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 16       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 16       | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 17       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 17       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 18       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 18       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 19       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 19       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 20       | 0.4           |
| (1,394) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 20       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 1        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 1        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 1        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 1        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 2        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 2        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 2        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 2        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 3        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 3        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 3        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 3        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 6        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 6        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 6        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 6        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 7        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 7        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 7        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 7        | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 11       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 11       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 11       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 11       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 12       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 12       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 12       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 12       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 13       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 13       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 13       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 13       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 14       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 14       | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 14       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 14       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 16       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 16       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 16       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 16       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 17       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 17       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 17       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 17       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 18       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 18       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 18       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 18       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 19       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 19       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 19       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 19       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 20       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 20       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 20       | 0.4           |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 20       | 0.4           |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB  | 4        | 0.4           |
| (1,351) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HB  | 8        | 0.4           |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 2        | 0.4           |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 2        | 0.4           |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 3        | 0.4           |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 3        | 0.4           |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 7        | 0.4           |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 7        | 0.4           |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 9        | 0.4           |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 9        | 0.4           |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 10       | 0.4           |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 10       | 0.4           |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 13       | 0.4           |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 13       | 0.4           |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 14       | 0.4           |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 14       | 0.4           |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 15       | 0.4           |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 15       | 0.4           |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 18       | 0.4           |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 18       | 0.4           |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|----------------|----------|---------------|
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H  | 1:A:11:PHE:HB2 | 20       | 0.4           |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H  | 1:A:11:PHE:HB3 | 20       | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 2        | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 2        | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 3        | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 3        | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 7        | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 7        | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 9        | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 9        | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 10       | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 10       | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 11       | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 11       | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 13       | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 13       | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 15       | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 15       | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 16       | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 16       | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 17       | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 17       | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 18       | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 18       | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 19       | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 19       | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 20       | 0.4           |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 20       | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 2        | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 2        | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 3        | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 3        | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 7        | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 7        | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 9        | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 9        | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 10       | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 10       | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 11       | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 11       | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB2 | 13       | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HB3 | 13       | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 15       | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 15       | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 16       | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 16       | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 17       | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 17       | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 18       | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 18       | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 19       | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 19       | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 20       | 0.4           |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 20       | 0.4           |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 2        | 0.4           |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 3        | 0.4           |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 5        | 0.4           |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 6        | 0.4           |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 7        | 0.4           |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 9        | 0.4           |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 10       | 0.4           |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 11       | 0.4           |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 12       | 0.4           |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 13       | 0.4           |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 14       | 0.4           |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 15       | 0.4           |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 16       | 0.4           |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 18       | 0.4           |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 20       | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H   | 1        | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 1        | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 1        | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H   | 3        | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 3        | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 3        | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H   | 6        | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 6        | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 6        | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H   | 7        | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 7        | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 7        | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H   | 8        | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 8        | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 8        | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H  | 10       | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 10       | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 10       | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H  | 11       | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 11       | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 11       | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H  | 12       | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 12       | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 12       | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H  | 16       | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 16       | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 16       | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H  | 18       | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 18       | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 18       | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H  | 20       | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 20       | 0.4           |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 20       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 1        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 1        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 1        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 1        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 1        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 1        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 2        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 2        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 2        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 2        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 2        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 2        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 3        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 3        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 3        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 3        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 3        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 3        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 5        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 5        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 5        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 5        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 5        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 5        | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 6        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 6        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 6        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 6        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 6        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 6        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 7        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 7        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 7        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 7        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 7        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 7        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 9        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 9        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 9        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 9        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 9        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 9        | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 10       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 10       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 10       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 10       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 10       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 10       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 12       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 12       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 12       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 12       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 12       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 12       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 13       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 13       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 13       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 13       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 13       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 13       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 16       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 16       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 16       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 16       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 16       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 16       | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 17       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 17       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 17       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 17       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 17       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 17       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 18       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 18       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 18       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 18       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 18       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 18       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 19       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 19       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 19       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 19       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 19       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 19       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD1 | 20       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HD2 | 20       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD1 | 20       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HD2 | 20       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD1 | 20       | 0.4           |
| (1,254) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HD2 | 20       | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 8        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 8        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 8        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 8        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 8        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 8        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.4           |
| (1,253) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.4           |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 11       | 0.4           |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 11       | 0.4           |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 11       | 0.4           |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 11       | 0.4           |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 18       | 0.4           |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 18       | 0.4           |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 18       | 0.4           |
| (1,24)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 18       | 0.4           |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 1        | 0.4           |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 2        | 0.4           |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 3        | 0.4           |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 5        | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 6        | 0.4           |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 7        | 0.4           |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 10       | 0.4           |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 11       | 0.4           |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 12       | 0.4           |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 13       | 0.4           |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 14       | 0.4           |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 15       | 0.4           |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 16       | 0.4           |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 18       | 0.4           |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 19       | 0.4           |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 20       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 1        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 1        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 1        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 1        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 1        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 1        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 3        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 3        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 3        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 3        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 3        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 3        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 4        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 4        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 4        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 4        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 4        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 4        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 6        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 6        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 6        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 6        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 6        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 6        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 7        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 7        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 7        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 7        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 7        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 7        | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 8        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 8        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 8        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 8        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 8        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 8        | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 10       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 10       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 10       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 10       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 10       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 10       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 16       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 16       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 16       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 16       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 16       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 16       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 18       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 18       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 18       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 18       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 18       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 18       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 20       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 20       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 20       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 20       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 20       | 0.4           |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 20       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 1        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 1        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 1        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 1        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 1        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 1        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 3        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 3        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 3        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 3        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 3        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 3        | 0.4           |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 4        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 4        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 4        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 4        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 4        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 4        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 6        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 6        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 6        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 6        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 6        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 6        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 7        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 7        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 7        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 7        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 7        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 7        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 8        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 8        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 8        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 8        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 8        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 8        | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 10       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 10       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 10       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 10       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 10       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 10       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 16       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 16       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 16       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 16       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 16       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 16       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 18       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 18       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 18       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 18       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 18       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 18       | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:6:ALA:HB1 | 20       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:6:ALA:HB2 | 20       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:6:ALA:HB3 | 20       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:6:ALA:HB1 | 20       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:6:ALA:HB2 | 20       | 0.4           |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:6:ALA:HB3 | 20       | 0.4           |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:H   | 9        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 1        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 1        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 1        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 1        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 1        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 1        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 1        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 1        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 1        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 1        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 1        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 1        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 2        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 2        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 2        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 2        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 2        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 2        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 2        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 2        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 2        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 2        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 2        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 2        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 5        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 5        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 5        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 5        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 5        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 5        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 5        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 5        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 5        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 5        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 5        | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 5        | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 12       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 12       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 12       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 12       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 12       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 12       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 12       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 12       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 12       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 12       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 12       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 12       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 13       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 13       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 13       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 13       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 13       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 13       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 13       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 13       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 13       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 13       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 13       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 13       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 14       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 14       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 14       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 14       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 14       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 14       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 14       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 14       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 14       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 14       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 14       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 14       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 19       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 19       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 19       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 19       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 19       | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 19       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 19       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 19       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 19       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 19       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 19       | 0.4           |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 19       | 0.4           |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB2 | 9        | 0.4           |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB3 | 9        | 0.4           |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB2 | 9        | 0.4           |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB3 | 9        | 0.4           |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:6:ALA:H   | 4        | 0.4           |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:6:ALA:H   | 4        | 0.4           |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:6:ALA:H   | 10       | 0.4           |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:6:ALA:H   | 10       | 0.4           |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:6:ALA:H   | 13       | 0.4           |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:6:ALA:H   | 13       | 0.4           |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:6:ALA:H   | 16       | 0.4           |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:6:ALA:H   | 16       | 0.4           |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:6:ALA:H   | 17       | 0.4           |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:6:ALA:H   | 17       | 0.4           |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:6:ALA:H   | 18       | 0.4           |
| (1,117) | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:6:ALA:H   | 18       | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:6:ALA:HB1 | 1        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:6:ALA:HB2 | 1        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:6:ALA:HB3 | 1        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3  | 1:A:6:ALA:HB1 | 1        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3  | 1:A:6:ALA:HB2 | 1        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3  | 1:A:6:ALA:HB3 | 1        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:6:ALA:HB1 | 4        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:6:ALA:HB2 | 4        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:6:ALA:HB3 | 4        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3  | 1:A:6:ALA:HB1 | 4        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3  | 1:A:6:ALA:HB2 | 4        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3  | 1:A:6:ALA:HB3 | 4        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:6:ALA:HB1 | 6        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:6:ALA:HB2 | 6        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:6:ALA:HB3 | 6        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3  | 1:A:6:ALA:HB1 | 6        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3  | 1:A:6:ALA:HB2 | 6        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3  | 1:A:6:ALA:HB3 | 6        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:6:ALA:HB1 | 7        | 0.4           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 7        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 7        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 7        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 7        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 7        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 8        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 8        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 8        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 8        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 8        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 8        | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 16       | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 16       | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 16       | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 16       | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 16       | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 16       | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 18       | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 18       | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 18       | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 18       | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 18       | 0.4           |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 18       | 0.4           |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG2 | 17       | 0.4           |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG3 | 17       | 0.4           |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG2 | 19       | 0.4           |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG3 | 19       | 0.4           |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG2 | 17       | 0.4           |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG3 | 17       | 0.4           |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG2 | 19       | 0.4           |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG3 | 19       | 0.4           |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:N  | 1        | 0.39          |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:N  | 2        | 0.39          |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:N  | 3        | 0.39          |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:N  | 5        | 0.39          |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:N  | 6        | 0.39          |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:N  | 7        | 0.39          |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:N  | 9        | 0.39          |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:N  | 10       | 0.39          |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:N  | 11       | 0.39          |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:N  | 13       | 0.39          |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:N  | 14       | 0.39          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O     | 1:A:13:LEU:N   | 15       | 0.39          |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O     | 1:A:13:LEU:N   | 16       | 0.39          |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O     | 1:A:13:LEU:N   | 17       | 0.39          |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O     | 1:A:13:LEU:N   | 18       | 0.39          |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O     | 1:A:13:LEU:N   | 19       | 0.39          |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O     | 1:A:13:LEU:N   | 20       | 0.39          |
| (1,97)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HA   | 9        | 0.39          |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 4        | 0.39          |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 6        | 0.39          |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 8        | 0.39          |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 10       | 0.39          |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 11       | 0.39          |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 12       | 0.39          |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 13       | 0.39          |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 14       | 0.39          |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 15       | 0.39          |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 17       | 0.39          |
| (1,734) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HA  | 11       | 0.39          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2  | 1:A:16:LYS:H   | 4        | 0.39          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3  | 1:A:16:LYS:H   | 4        | 0.39          |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:17:LYS:H   | 4        | 0.39          |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:17:LYS:H   | 8        | 0.39          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 11       | 0.39          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 11       | 0.39          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 11       | 0.39          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 11       | 0.39          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 11       | 0.39          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 11       | 0.39          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 11       | 0.39          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 11       | 0.39          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 11       | 0.39          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 11       | 0.39          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 11       | 0.39          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 11       | 0.39          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 11       | 0.39          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 11       | 0.39          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 11       | 0.39          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 11       | 0.39          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 11       | 0.39          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 11       | 0.39          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 11       | 0.39          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 11       | 0.39          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2  | 11       | 0.39          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3  | 11       | 0.39          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2  | 11       | 0.39          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3  | 11       | 0.39          |
| (1,630) | 1:A:13:LEU:HB2  | 1:A:14:GLN:HG2  | 8        | 0.39          |
| (1,630) | 1:A:13:LEU:HB2  | 1:A:14:GLN:HG3  | 8        | 0.39          |
| (1,630) | 1:A:13:LEU:HB3  | 1:A:14:GLN:HG2  | 8        | 0.39          |
| (1,630) | 1:A:13:LEU:HB3  | 1:A:14:GLN:HG3  | 8        | 0.39          |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:13:LEU:H    | 4        | 0.39          |
| (1,627) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:13:LEU:H    | 8        | 0.39          |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:H    | 15       | 0.39          |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:H    | 15       | 0.39          |
| (1,592) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:H    | 15       | 0.39          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:14:GLN:H    | 15       | 0.39          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:14:GLN:H    | 15       | 0.39          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA   | 11       | 0.39          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA   | 11       | 0.39          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:14:GLN:HE21 | 4        | 0.39          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:14:GLN:HE22 | 4        | 0.39          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:14:GLN:HE21 | 8        | 0.39          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:14:GLN:HE22 | 8        | 0.39          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.39          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.39          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.39          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.39          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.39          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.39          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.39          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.39          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.39          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.39          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.39          |
| (1,510) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.39          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:HD11 | 8        | 0.39          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:HD12 | 8        | 0.39          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:12:ILE:HD13 | 8        | 0.39          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:11:PHE:HE1  | 4        | 0.39          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:11:PHE:HE2  | 4        | 0.39          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:11:PHE:HE1  | 4        | 0.39          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:11:PHE:HE2  | 4        | 0.39          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:11:PHE:HE1  | 8        | 0.39          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:11:PHE:HE2  | 8        | 0.39          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 8        | 0.39          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 8        | 0.39          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 12       | 0.39          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 12       | 0.39          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 12       | 0.39          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 12       | 0.39          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 19       | 0.39          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 19       | 0.39          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 19       | 0.39          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 19       | 0.39          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 4        | 0.39          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 4        | 0.39          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 4        | 0.39          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 4        | 0.39          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 8        | 0.39          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 8        | 0.39          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 8        | 0.39          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 8        | 0.39          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 12       | 0.39          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 12       | 0.39          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 12       | 0.39          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 12       | 0.39          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 19       | 0.39          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 19       | 0.39          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 19       | 0.39          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 19       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:12:ILE:HD11 | 2        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:12:ILE:HD12 | 2        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:12:ILE:HD13 | 2        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:12:ILE:HD11 | 2        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:12:ILE:HD12 | 2        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:12:ILE:HD13 | 2        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:12:ILE:HD11 | 3        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:12:ILE:HD12 | 3        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:12:ILE:HD13 | 3        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:12:ILE:HD11 | 3        | 0.39          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 3        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 3        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 5        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 5        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 5        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 5        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 5        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 5        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 6        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 6        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 6        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 6        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 6        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 6        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 7        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 7        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 7        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 7        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 7        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 7        | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 10       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 10       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 10       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 10       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 10       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 10       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 13       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 13       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 13       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 13       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 13       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 13       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 14       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 14       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 14       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 14       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 14       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 14       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 17       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 17       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 17       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 17       | 0.39          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 17       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 17       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 18       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 18       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 18       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 18       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 18       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 18       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 19       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 19       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 19       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 19       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 19       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 19       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 20       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 20       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 20       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 20       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 20       | 0.39          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 20       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 2        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 2        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 2        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 2        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 3        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 3        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 3        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 3        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 4        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 4        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 4        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 4        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 5        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 5        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 5        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 5        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 6        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 6        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 6        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 6        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 7        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 7        | 0.39          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 7        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 7        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 8        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 8        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 8        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 8        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 9        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 9        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 9        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 9        | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 10       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 10       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 10       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 10       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 11       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 11       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 11       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 11       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 13       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 13       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 13       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 13       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 14       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 14       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 14       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 14       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 16       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 16       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 17       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 17       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 17       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 17       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 19       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 19       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 19       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 19       | 0.39          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.39          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 1        | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 1        | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 2        | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 2        | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 3        | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 3        | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 4        | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 4        | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 5        | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 5        | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 6        | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 6        | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 7        | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 7        | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 8        | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 8        | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 9        | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 9        | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 10       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 10       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 11       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 11       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 12       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 12       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 13       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 13       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 14       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 14       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 15       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 15       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 16       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 16       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 17       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 17       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 18       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 18       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 19       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 19       | 0.39          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:8:PHE:HZ   | 20       | 0.39          |
| (1,383) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:8:PHE:HZ   | 20       | 0.39          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 4        | 0.39          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 4        | 0.39          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 4        | 0.39          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 4        | 0.39          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 8        | 0.39          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 8        | 0.39          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 8        | 0.39          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 8        | 0.39          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 5        | 0.39          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 5        | 0.39          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 5        | 0.39          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 5        | 0.39          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 15       | 0.39          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 15       | 0.39          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 15       | 0.39          |
| (1,362) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 15       | 0.39          |
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA  | 4        | 0.39          |
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA  | 8        | 0.39          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 1        | 0.39          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 1        | 0.39          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 5        | 0.39          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 5        | 0.39          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.39          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.39          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 11       | 0.39          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 11       | 0.39          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 12       | 0.39          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 12       | 0.39          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 16       | 0.39          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 16       | 0.39          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 17       | 0.39          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 17       | 0.39          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 19       | 0.39          |
| (1,334) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 19       | 0.39          |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 1        | 0.39          |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 1        | 0.39          |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 5        | 0.39          |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 5        | 0.39          |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.39          |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.39          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 12       | 0.39          |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 12       | 0.39          |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 14       | 0.39          |
| (1,326) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 14       | 0.39          |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 1        | 0.39          |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 1        | 0.39          |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 5        | 0.39          |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 5        | 0.39          |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.39          |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.39          |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 12       | 0.39          |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 12       | 0.39          |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 14       | 0.39          |
| (1,325) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 14       | 0.39          |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 17       | 0.39          |
| (1,310) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:HA   | 19       | 0.39          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HG   | 1        | 0.39          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HG   | 1        | 0.39          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HG   | 8        | 0.39          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HG   | 8        | 0.39          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HG   | 11       | 0.39          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HG   | 11       | 0.39          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HG   | 12       | 0.39          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HG   | 12       | 0.39          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HG   | 15       | 0.39          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HG   | 15       | 0.39          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HG   | 17       | 0.39          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HG   | 17       | 0.39          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H   | 2        | 0.39          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 2        | 0.39          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 2        | 0.39          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H   | 5        | 0.39          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 5        | 0.39          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 5        | 0.39          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H   | 13       | 0.39          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 13       | 0.39          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 13       | 0.39          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H   | 15       | 0.39          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 15       | 0.39          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 15       | 0.39          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H   | 17       | 0.39          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 17       | 0.39          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 17       | 0.39          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H  | 19       | 0.39          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H  | 19       | 0.39          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H  | 19       | 0.39          |
| (1,223) | 1:A:5:SER:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 17       | 0.39          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 11       | 0.39          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 11       | 0.39          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 11       | 0.39          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 11       | 0.39          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 11       | 0.39          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 11       | 0.39          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 12       | 0.39          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 12       | 0.39          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 12       | 0.39          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 12       | 0.39          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 12       | 0.39          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 12       | 0.39          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 15       | 0.39          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 15       | 0.39          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 15       | 0.39          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 15       | 0.39          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 15       | 0.39          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 15       | 0.39          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 11       | 0.39          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 11       | 0.39          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 11       | 0.39          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 11       | 0.39          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 11       | 0.39          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 11       | 0.39          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 12       | 0.39          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 12       | 0.39          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 12       | 0.39          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 12       | 0.39          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 12       | 0.39          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 12       | 0.39          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1 | 15       | 0.39          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2 | 15       | 0.39          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3 | 15       | 0.39          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1 | 15       | 0.39          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2 | 15       | 0.39          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3 | 15       | 0.39          |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:H   | 1        | 0.39          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:H   | 3        | 0.39          |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:H   | 4        | 0.39          |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:H   | 6        | 0.39          |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:H   | 7        | 0.39          |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:H   | 8        | 0.39          |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:H   | 10       | 0.39          |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:H   | 15       | 0.39          |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:H   | 16       | 0.39          |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:H   | 18       | 0.39          |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:H   | 20       | 0.39          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE1 | 17       | 0.39          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE2 | 17       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 3        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 3        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 3        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 3        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 3        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 3        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 3        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 3        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 3        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 3        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 3        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 3        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 4        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 4        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 4        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 4        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 4        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 4        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 4        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 4        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 4        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 4        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 4        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 4        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 6        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 6        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 6        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 6        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 6        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 6        | 0.39          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 6        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 6        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 6        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 6        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 6        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 6        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 7        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 7        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 7        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 7        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 7        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 7        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 7        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 7        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 7        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 7        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 7        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 7        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 8        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 8        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 8        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 8        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 8        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 8        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 8        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 8        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 8        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 8        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 8        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 8        | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 10       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 10       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 10       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 10       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 10       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 10       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 10       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 10       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 10       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 10       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 10       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 10       | 0.39          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 11       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 11       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 11       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 11       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 11       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 11       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 11       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 11       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 11       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 11       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 11       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 11       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 15       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 15       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 15       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 15       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 15       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 15       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 15       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 15       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 15       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 15       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 15       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 15       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 16       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 16       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 16       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 16       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 16       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 16       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 16       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 16       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 16       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 16       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 16       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 16       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 17       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 17       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 17       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 17       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 17       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 17       | 0.39          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 17       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 17       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 17       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 17       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 17       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 17       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 18       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 18       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 18       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 18       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 18       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 18       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 18       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 18       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 18       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 18       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 18       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 18       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 20       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 20       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 20       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 20       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 20       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 20       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 20       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 20       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 20       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 20       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 20       | 0.39          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 20       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB2 | 1        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB3 | 1        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB2 | 1        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB3 | 1        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB2 | 2        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB3 | 2        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB2 | 2        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB3 | 2        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB2 | 3        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB3 | 3        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB2 | 3        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB3 | 3        | 0.39          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 4        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 4        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 4        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 4        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 5        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 5        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 5        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 5        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 6        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 6        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 6        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 6        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 7        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 7        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 7        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 7        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 8        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 8        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 8        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 8        | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 10       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 10       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 10       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 10       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 11       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 11       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 11       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 11       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 12       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 12       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 12       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 12       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 13       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 13       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 13       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 13       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 14       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 14       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 14       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 14       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 15       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 15       | 0.39          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2   | 15       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3   | 15       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2   | 16       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3   | 16       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2   | 16       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3   | 16       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2   | 17       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3   | 17       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2   | 17       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3   | 17       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2   | 18       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3   | 18       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2   | 18       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3   | 18       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2   | 19       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3   | 19       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2   | 19       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3   | 19       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2   | 20       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3   | 20       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2   | 20       | 0.39          |
| (1,142) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3   | 20       | 0.39          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB1   | 10       | 0.39          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB2   | 10       | 0.39          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:6:ALA:HB3   | 10       | 0.39          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB1   | 10       | 0.39          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB2   | 10       | 0.39          |
| (1,116) | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:6:ALA:HB3   | 10       | 0.39          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG2   | 8        | 0.39          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG3   | 8        | 0.39          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG2   | 16       | 0.39          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG3   | 16       | 0.39          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2   | 9        | 0.39          |
| (1,105) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3   | 9        | 0.39          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB2   | 9        | 0.39          |
| (1,104) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:5:SER:HB3   | 9        | 0.39          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG2   | 8        | 0.39          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG3   | 8        | 0.39          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG2   | 16       | 0.39          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG3   | 16       | 0.39          |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O   | 1:A:13:LEU:N    | 12       | 0.38          |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 4        | 0.38          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 4        | 0.38          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.38          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.38          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.38          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.38          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 4        | 0.38          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 4        | 0.38          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.38          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.38          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.38          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 1        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 1        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 2        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 2        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 6        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 6        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 7        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 7        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 10       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 10       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 12       | 0.38          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H | 1:A:12:ILE:HG13 | 12       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H | 1:A:12:ILE:HG12 | 15       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H | 1:A:12:ILE:HG13 | 15       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H | 1:A:12:ILE:HG12 | 20       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H | 1:A:12:ILE:HG13 | 20       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.38          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 1        | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 1        | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 6        | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 6        | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 12       | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 12       | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 15       | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 15       | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.38          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.38          |
| (1,97) | 1:A:3:ARG:H  | 1:A:4:LEU:HA    | 1        | 0.38          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,97)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HA   | 4        | 0.38          |
| (1,97)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HA   | 6        | 0.38          |
| (1,97)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HA   | 7        | 0.38          |
| (1,97)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HA   | 8        | 0.38          |
| (1,97)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HA   | 10       | 0.38          |
| (1,97)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HA   | 16       | 0.38          |
| (1,97)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HA   | 18       | 0.38          |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 1        | 0.38          |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 3        | 0.38          |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 7        | 0.38          |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 16       | 0.38          |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 18       | 0.38          |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG   | 20       | 0.38          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE2  | 1:A:17:LYS:HA  | 11       | 0.38          |
| (1,739) | 1:A:16:LYS:HE3  | 1:A:17:LYS:HA  | 11       | 0.38          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2  | 1:A:16:LYS:H   | 8        | 0.38          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3  | 1:A:16:LYS:H   | 8        | 0.38          |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA  | 4        | 0.38          |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA  | 4        | 0.38          |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA  | 8        | 0.38          |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA  | 8        | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 9        | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 9        | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 9        | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 9        | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 9        | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 9        | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 9        | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 9        | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 9        | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 9        | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 9        | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 9        | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 12       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 12       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 12       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 12       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 12       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 12       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 12       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 12       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 12       | 0.38          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 12       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 12       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 12       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 13       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 13       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 13       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 13       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 13       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 13       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 13       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 13       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 13       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 13       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 13       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 13       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 14       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 14       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 14       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 14       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 14       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 14       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 14       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 14       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 14       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 14       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 14       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 14       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 17       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 17       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 17       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 17       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 17       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 17       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 17       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 17       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 17       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 17       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 17       | 0.38          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 17       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 9        | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 9        | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 9        | 0.38          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 9        | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 9        | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 9        | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 9        | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 9        | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 9        | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 9        | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 9        | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 9        | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 12       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 12       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 12       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 12       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 12       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 12       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 12       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 12       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 12       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 12       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 12       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 12       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 13       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 13       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 13       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 13       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 13       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 13       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 13       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 13       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 13       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 13       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 13       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 13       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 14       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 14       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 14       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 14       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 14       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 14       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 14       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 14       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 14       | 0.38          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 14       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 14       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 14       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 17       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 17       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 17       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 17       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 17       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 17       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 17       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 17       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 17       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 17       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 17       | 0.38          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 17       | 0.38          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HA  | 4        | 0.38          |
| (1,581) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HA  | 8        | 0.38          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HB  | 4        | 0.38          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HB  | 4        | 0.38          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HB  | 8        | 0.38          |
| (1,544) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HB  | 8        | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA  | 1        | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA  | 1        | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA  | 2        | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA  | 2        | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA  | 3        | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA  | 3        | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA  | 6        | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA  | 6        | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA  | 7        | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA  | 7        | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA  | 9        | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA  | 9        | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA  | 10       | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA  | 10       | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA  | 13       | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA  | 13       | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA  | 17       | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA  | 17       | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA  | 18       | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA  | 18       | 0.38          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA  | 20       | 0.38          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HA   | 20       | 0.38          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 4        | 0.38          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 4        | 0.38          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 4        | 0.38          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 8        | 0.38          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 8        | 0.38          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 8        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 1        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 1        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 1        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 1        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 2        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 2        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 2        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 2        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 3        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 3        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 3        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 3        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 5        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 5        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 5        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 5        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 6        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 6        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 6        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 6        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 7        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 7        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 7        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 7        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 9        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 9        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 9        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 9        | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 10       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 10       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 10       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 10       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 11       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 11       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 11       | 0.38          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 11       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 12       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 12       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 12       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 12       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 13       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 13       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 13       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 13       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 14       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 14       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 14       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 14       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 15       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 15       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 15       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 15       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 16       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 16       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 17       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 17       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 17       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 17       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 19       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 19       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 19       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 19       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.38          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.38          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:H   | 4        | 0.38          |
| (1,522) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:H   | 8        | 0.38          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2 | 4        | 0.38          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3 | 4        | 0.38          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2 | 8        | 0.38          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 8        | 0.38          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 4        | 0.38          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 4        | 0.38          |
| (1,495) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 4        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 1        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 1        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 1        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 1        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 2        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 2        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 2        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 2        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 3        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 3        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 3        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 3        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 5        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 5        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 5        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 5        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 6        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 6        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 6        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 6        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 7        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 7        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 7        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 7        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 9        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 9        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 9        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 9        | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 10       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 10       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 10       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 10       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 11       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 11       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 11       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 11       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 13       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 13       | 0.38          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 13       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 13       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 14       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 14       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 14       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 14       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 16       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 16       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 17       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 17       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 17       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 17       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.38          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 1        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 1        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 1        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 1        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 2        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 2        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 2        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 2        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 3        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 3        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 3        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 3        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 5        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 5        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 5        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 5        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 6        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 6        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1 | 6        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2 | 6        | 0.38          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 7        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 7        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 7        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 7        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 9        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 9        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 9        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 9        | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 10       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 10       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 10       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 10       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 11       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 11       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 11       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 11       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 13       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 13       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 13       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 13       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 14       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 14       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 14       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 14       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 16       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 16       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 16       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 16       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 17       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 17       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 17       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 17       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 18       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 18       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 18       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 18       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 20       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 20       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 20       | 0.38          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 20       | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.38          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.38          |
| (1,465) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 11       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 11       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 11       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 11       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 11       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 11       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 12       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 12       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 12       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 12       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 12       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 12       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 15       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 15       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 15       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 15       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 15       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 15       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD11 | 16       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD12 | 16       | 0.38          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:12:ILE:HD13 | 16       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD11 | 16       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD12 | 16       | 0.38          |
| (1,453) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:12:ILE:HD13 | 16       | 0.38          |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HA   | 4        | 0.38          |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HA   | 8        | 0.38          |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA   | 13       | 0.38          |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA   | 15       | 0.38          |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA   | 19       | 0.38          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 15       | 0.38          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 15       | 0.38          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 15       | 0.38          |
| (1,397) | 1:A:8:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 15       | 0.38          |
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA   | 11       | 0.38          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HG    | 3        | 0.38          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HG    | 3        | 0.38          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HG    | 4        | 0.38          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HG    | 4        | 0.38          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HG    | 6        | 0.38          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HG    | 6        | 0.38          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HG    | 7        | 0.38          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HG    | 7        | 0.38          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HG    | 10       | 0.38          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HG    | 10       | 0.38          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HG    | 16       | 0.38          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HG    | 16       | 0.38          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HG    | 18       | 0.38          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HG    | 18       | 0.38          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HG    | 20       | 0.38          |
| (1,28)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HG    | 20       | 0.38          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H    | 9        | 0.38          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H    | 9        | 0.38          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H    | 9        | 0.38          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:10:ASP:H    | 14       | 0.38          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:10:ASP:H    | 14       | 0.38          |
| (1,269) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:10:ASP:H    | 14       | 0.38          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB1   | 9        | 0.38          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB2   | 9        | 0.38          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:6:ALA:HB3   | 9        | 0.38          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB1   | 9        | 0.38          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB2   | 9        | 0.38          |
| (1,216) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:6:ALA:HB3   | 9        | 0.38          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:6:ALA:HB1 | 9        | 0.38          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:6:ALA:HB2 | 9        | 0.38          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:6:ALA:HB3 | 9        | 0.38          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:6:ALA:HB1 | 9        | 0.38          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:6:ALA:HB2 | 9        | 0.38          |
| (1,214) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:6:ALA:HB3 | 9        | 0.38          |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:H   | 11       | 0.38          |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:H   | 12       | 0.38          |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:H   | 17       | 0.38          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE1 | 2        | 0.38          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE2 | 2        | 0.38          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE1 | 9        | 0.38          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE2 | 9        | 0.38          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE1 | 13       | 0.38          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HE2 | 13       | 0.38          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ  | 4        | 0.38          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ  | 4        | 0.38          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ  | 4        | 0.38          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ  | 4        | 0.38          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ  | 4        | 0.38          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ  | 4        | 0.38          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ  | 8        | 0.38          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ  | 8        | 0.38          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ  | 8        | 0.38          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ  | 8        | 0.38          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ  | 8        | 0.38          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ  | 8        | 0.38          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB2 | 9        | 0.38          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HB3 | 9        | 0.38          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB2 | 9        | 0.38          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HB3 | 9        | 0.38          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB2 | 9        | 0.38          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HB3 | 9        | 0.38          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB2 | 9        | 0.38          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HB3 | 9        | 0.38          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB2 | 9        | 0.38          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HB3 | 9        | 0.38          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB2 | 9        | 0.38          |
| (1,178) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HB3 | 9        | 0.38          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ  | 4        | 0.38          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ  | 4        | 0.38          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ  | 4        | 0.38          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ    | 4        | 0.38          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ    | 4        | 0.38          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ    | 4        | 0.38          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ    | 8        | 0.38          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ    | 8        | 0.38          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ    | 8        | 0.38          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ    | 8        | 0.38          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ    | 8        | 0.38          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ    | 8        | 0.38          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG2   | 4        | 0.38          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG3   | 4        | 0.38          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG2   | 6        | 0.38          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG3   | 6        | 0.38          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG2   | 7        | 0.38          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG3   | 7        | 0.38          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG2   | 10       | 0.38          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG3   | 10       | 0.38          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG2   | 12       | 0.38          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG3   | 12       | 0.38          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG2   | 4        | 0.38          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG3   | 4        | 0.38          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG2   | 6        | 0.38          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG3   | 6        | 0.38          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG2   | 7        | 0.38          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG3   | 7        | 0.38          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG2   | 10       | 0.38          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG3   | 10       | 0.38          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG2   | 12       | 0.38          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG3   | 12       | 0.38          |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG12 | 1        | 0.37          |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG13 | 1        | 0.37          |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.37          |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.37          |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.37          |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.37          |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG12 | 1        | 0.37          |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG13 | 1        | 0.37          |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.37          |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.37          |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.37          |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.37          |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG12 | 2        | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key   | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|-------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 2        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 2        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 2        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 6        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 6        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 6        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 6        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 7        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 7        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 7        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 7        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 8        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 8        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 8        | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key   | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|-------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 8        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 10       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 10       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 10       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 10       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 12       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 12       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 12       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 12       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 15       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 15       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 15       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 15       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.37          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 20       | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 20       | 0.37          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.37          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.37          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.37          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.37          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 20       | 0.37          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 20       | 0.37          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.37          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.37          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.37          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 3        | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 3        | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 11       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 11       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 13       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 13       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 14       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 14       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 18       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 18       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.37          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.37          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:12:ILE:HG12 | 2        | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG13 | 2        | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG12 | 7        | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG13 | 7        | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG12 | 10       | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG13 | 10       | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG12 | 20       | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG13 | 20       | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.37          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.37          |
| (1,97)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HA    | 3        | 0.37          |
| (1,97)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HA    | 11       | 0.37          |
| (1,97)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HA    | 12       | 0.37          |
| (1,97)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HA    | 15       | 0.37          |
| (1,97)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HA    | 17       | 0.37          |
| (1,97)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HA    | 20       | 0.37          |
| (1,88)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HG    | 9        | 0.37          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:16:LYS:HE2  | 11       | 0.37          |
| (1,723) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:16:LYS:HE3  | 11       | 0.37          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.37          |
| (1,715) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.37          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2  | 1:A:16:LYS:HA   | 11       | 0.37          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3  | 1:A:16:LYS:HA   | 11       | 0.37          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA   | 1:A:16:LYS:H    | 15       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2  | 1        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3  | 1        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2  | 1        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3  | 1        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2  | 1        | 0.37          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 1        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 1        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 1        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 1        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 1        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 1        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 1        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 2        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 2        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 2        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 2        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 2        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 2        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 2        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 2        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 2        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 2        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 2        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 2        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 3        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 3        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 3        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 3        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 3        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 3        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 3        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 3        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 3        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 3        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 3        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 3        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 5        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 5        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 5        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 5        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 5        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 5        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 5        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 5        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 5        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 5        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 5        | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 5        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 6        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 6        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 6        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 6        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 6        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 6        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 6        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 6        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 6        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 6        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 6        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 6        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 7        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 7        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 7        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 7        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 7        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 7        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 7        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 7        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 7        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 7        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 7        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 7        | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 10       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 10       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 10       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 10       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 10       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 10       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 10       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 10       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 10       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 10       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 10       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 10       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 16       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 16       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 16       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 16       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 16       | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 16       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 16       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 16       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 16       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 16       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 16       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 16       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 18       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 18       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 18       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 18       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 18       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 18       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 18       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 18       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 18       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 18       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 18       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 18       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 19       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 19       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 19       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 19       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 19       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 19       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 19       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 19       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 19       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 19       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 19       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 19       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20       | 0.37          |
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20       | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,644) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 1        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 1        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 1        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 1        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 1        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 1        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 1        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 1        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 1        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 1        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 1        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 1        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 2        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 2        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 2        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 2        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 2        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 2        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 2        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 2        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 2        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 2        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 2        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 2        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 3        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 3        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 3        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 3        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 3        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 3        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 3        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 3        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 3        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 3        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 3        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 3        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 5        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 5        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 5        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 5        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 5        | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 5        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 5        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 5        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 5        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 5        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 5        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 5        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 6        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 6        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 6        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 6        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 6        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 6        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 6        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 6        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 6        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 6        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 6        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 6        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 7        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 7        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 7        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 7        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 7        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 7        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 7        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 7        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 7        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 7        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 7        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 7        | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 10       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 10       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 10       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 10       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 10       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 10       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 10       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 10       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 10       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 10       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 10       | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 10       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 16       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 16       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 16       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 16       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 16       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 16       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 16       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 16       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 16       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 16       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 16       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 16       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 18       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 18       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 18       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 18       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 18       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 18       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 18       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 18       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 18       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 18       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 18       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 18       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 19       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 19       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 19       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 19       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 19       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3 | 19       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2 | 19       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3 | 19       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2 | 19       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3 | 19       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2 | 19       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3 | 19       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20       | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HD3  | 20       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD2  | 20       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HD3  | 20       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD2  | 20       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HD3  | 20       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD2  | 20       | 0.37          |
| (1,643) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HD3  | 20       | 0.37          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA   | 5        | 0.37          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA   | 5        | 0.37          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA   | 14       | 0.37          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA   | 14       | 0.37          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA   | 15       | 0.37          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA   | 15       | 0.37          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA   | 16       | 0.37          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA   | 16       | 0.37          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA   | 19       | 0.37          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA   | 19       | 0.37          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HB   | 4        | 0.37          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HB   | 4        | 0.37          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HB   | 8        | 0.37          |
| (1,540) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HB   | 8        | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD11 | 2        | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD12 | 2        | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD13 | 2        | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD11 | 5        | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD12 | 5        | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD13 | 5        | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD11 | 6        | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD12 | 6        | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD13 | 6        | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD11 | 9        | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD12 | 9        | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD13 | 9        | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD11 | 10       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD12 | 10       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD13 | 10       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD11 | 12       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD12 | 12       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD13 | 12       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD11 | 13       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD12 | 13       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD13 | 13       | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 14       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 14       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 14       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 15       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 15       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 15       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 16       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 16       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 16       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 17       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 17       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 17       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 18       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 18       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 18       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 19       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 19       | 0.37          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 19       | 0.37          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 4        | 0.37          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 4        | 0.37          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 4        | 0.37          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 4        | 0.37          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 8        | 0.37          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 8        | 0.37          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 8        | 0.37          |
| (1,527) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 8        | 0.37          |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA   | 15       | 0.37          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 4        | 0.37          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 4        | 0.37          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 8        | 0.37          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 8        | 0.37          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 12       | 0.37          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 12       | 0.37          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 15       | 0.37          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 15       | 0.37          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 15       | 0.37          |
| (1,487) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 15       | 0.37          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 15       | 0.37          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 15       | 0.37          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 15       | 0.37          |
| (1,483) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 15       | 0.37          |
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HG   | 4        | 0.37          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HG  | 8        | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 1        | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 1        | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 2        | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 2        | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 3        | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 3        | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 5        | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 5        | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 7        | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 7        | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 9        | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 9        | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 10       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 10       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 11       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 11       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 12       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 12       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 13       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 13       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 14       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 14       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 15       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 15       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 16       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 16       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 17       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 17       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 18       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 18       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 19       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 19       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB2 | 20       | 0.37          |
| (1,449) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HB3 | 20       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA  | 1        | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA  | 1        | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA  | 2        | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA  | 2        | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA  | 3        | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 3        | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 4        | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 4        | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 5        | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 5        | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 6        | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 6        | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 7        | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 7        | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 8        | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 8        | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 9        | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 9        | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 10       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 10       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 11       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 11       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 12       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 12       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 13       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 13       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 14       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 14       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 15       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 15       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 16       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 16       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 17       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 17       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 18       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 18       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 19       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 19       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 20       | 0.37          |
| (1,435) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 20       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 1        | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 1        | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 2        | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 2        | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 3        | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 3        | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 4        | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 4        | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 5        | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 5        | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 6        | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 6        | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 7        | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 7        | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 8        | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 8        | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 9        | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 9        | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 10       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 10       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 11       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 11       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 12       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 12       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 13       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 13       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 14       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 14       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 15       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 15       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 16       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 16       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 17       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 17       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 18       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 18       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 19       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 19       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:HA | 20       | 0.37          |
| (1,433) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:HA | 20       | 0.37          |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA | 1        | 0.37          |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA | 2        | 0.37          |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA | 3        | 0.37          |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA | 4        | 0.37          |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA | 5        | 0.37          |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA | 6        | 0.37          |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA | 7        | 0.37          |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA | 8        | 0.37          |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA | 9        | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA  | 10       | 0.37          |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA  | 11       | 0.37          |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA  | 12       | 0.37          |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA  | 14       | 0.37          |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA  | 16       | 0.37          |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA  | 17       | 0.37          |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA  | 18       | 0.37          |
| (1,429) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:10:ASP:HA  | 20       | 0.37          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 1        | 0.37          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 2        | 0.37          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 3        | 0.37          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 5        | 0.37          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 6        | 0.37          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 7        | 0.37          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 9        | 0.37          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 10       | 0.37          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 11       | 0.37          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 12       | 0.37          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 13       | 0.37          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 14       | 0.37          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 15       | 0.37          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 16       | 0.37          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 17       | 0.37          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 18       | 0.37          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 19       | 0.37          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 20       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 3        | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 3        | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 3        | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 3        | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 3        | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 3        | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 3        | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 3        | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 3        | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 3        | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 3        | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 3        | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 4        | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 4        | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 4        | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 4        | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 4        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 4        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 4        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 4        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 4        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 4        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 4        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 4        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 6        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 6        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 6        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 6        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 6        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 6        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 6        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 6        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 6        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 6        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 6        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 6        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 7        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 7        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 7        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 7        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 7        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 7        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 7        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 7        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 7        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 7        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 7        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 7        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 8        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 8        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 8        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 8        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 8        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 8        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 8        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 8        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 8        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 8        | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 8        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 8        | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 10       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 10       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 10       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 10       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 10       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 10       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 10       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 10       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 10       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 10       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 10       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 10       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 11       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 11       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 11       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 11       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 11       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 11       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 11       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 11       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 11       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 11       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 11       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 11       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 12       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 12       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 12       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 12       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 12       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 12       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 12       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 12       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 12       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 12       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 12       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 12       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 15       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 15       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 15       | 0.37          |
| (1,36) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 15       | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 15       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 15       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 15       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 15       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 15       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 15       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 15       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 15       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 16       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 16       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 16       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 16       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 16       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 16       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 16       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 16       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 16       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 16       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 16       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 16       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 20       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 20       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 20       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 20       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 20       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 20       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 20       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 20       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 20       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 20       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 20       | 0.37          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 20       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.37          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.37          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.37          |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H    | 15       | 0.37          |
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA   | 2        | 0.37          |
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA   | 3        | 0.37          |
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA   | 6        | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA  | 7        | 0.37          |
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA  | 10       | 0.37          |
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA  | 12       | 0.37          |
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA  | 13       | 0.37          |
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA  | 14       | 0.37          |
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA  | 16       | 0.37          |
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA  | 17       | 0.37          |
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA  | 18       | 0.37          |
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA  | 19       | 0.37          |
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA  | 20       | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 3        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 3        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 3        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 3        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 3        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 3        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 3        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 3        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 3        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 3        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 3        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 3        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 4        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 4        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 4        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 4        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 4        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 4        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 4        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 4        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 4        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 4        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 4        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 4        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 6        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 6        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 6        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 6        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 6        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 6        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 6        | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 6        | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 6        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 6        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 6        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 6        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 7        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 7        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 7        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 7        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 7        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 7        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 7        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 7        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 7        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 7        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 7        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 7        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 8        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 8        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 8        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 8        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 8        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 8        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 8        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 8        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 8        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 8        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 8        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 8        | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 10       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 10       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 10       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 10       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 10       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 10       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 10       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 10       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 10       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 10       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 10       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 10       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 11       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 11       | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 11       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 11       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 11       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 11       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 11       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 11       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 11       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 11       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 11       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 11       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 12       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 12       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 12       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 12       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 12       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 12       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 12       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 12       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 12       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 12       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 12       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 12       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 15       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 15       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 15       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 15       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 15       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 15       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 15       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 15       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 15       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 15       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 15       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 15       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 16       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 16       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 16       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 16       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 16       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 16       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 16       | 0.37          |
| (1,33) | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 16       | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 16       | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 16       | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 16       | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 16       | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 20       | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 20       | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 20       | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 20       | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 20       | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 20       | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 20       | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 20       | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 20       | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 20       | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 20       | 0.37          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 20       | 0.37          |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 12       | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2  | 1        | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3  | 1        | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2  | 1        | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3  | 1        | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2  | 9        | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3  | 9        | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2  | 9        | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3  | 9        | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2  | 12       | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3  | 12       | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2  | 12       | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3  | 12       | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2  | 14       | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3  | 14       | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2  | 14       | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3  | 14       | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2  | 17       | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3  | 17       | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2  | 17       | 0.37          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3  | 17       | 0.37          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 9        | 0.37          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 9        | 0.37          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 9        | 0.37          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 9        | 0.37          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 9        | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 9        | 0.37          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 9        | 0.37          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 9        | 0.37          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 9        | 0.37          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 9        | 0.37          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 9        | 0.37          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 9        | 0.37          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA   | 1        | 0.37          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA   | 3        | 0.37          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA   | 5        | 0.37          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA   | 6        | 0.37          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA   | 7        | 0.37          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA   | 15       | 0.37          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA   | 16       | 0.37          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA   | 18       | 0.37          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA   | 20       | 0.37          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ   | 1        | 0.37          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ   | 2        | 0.37          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ   | 3        | 0.37          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ   | 5        | 0.37          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ   | 6        | 0.37          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ   | 7        | 0.37          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ   | 9        | 0.37          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ   | 10       | 0.37          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ   | 11       | 0.37          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ   | 12       | 0.37          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ   | 13       | 0.37          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ   | 14       | 0.37          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ   | 16       | 0.37          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ   | 17       | 0.37          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ   | 18       | 0.37          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ   | 19       | 0.37          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ   | 20       | 0.37          |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:H    | 2        | 0.37          |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:H    | 5        | 0.37          |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:H    | 13       | 0.37          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HE1  | 5        | 0.37          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HE2  | 5        | 0.37          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HE1  | 14       | 0.37          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HE2  | 14       | 0.37          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HE1  | 19       | 0.37          |
| (1,184) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HE2  | 19       | 0.37          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,11) | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG2   | 1        | 0.37          |
| (1,11) | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG3   | 1        | 0.37          |
| (1,11) | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG2   | 18       | 0.37          |
| (1,11) | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG3   | 18       | 0.37          |
| (1,10) | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG2   | 1        | 0.37          |
| (1,10) | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG3   | 1        | 0.37          |
| (1,10) | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG2   | 18       | 0.37          |
| (1,10) | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:3:ARG:HG3   | 18       | 0.37          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 3        | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 3        | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 3        | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 3        | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 13       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 13       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 13       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 13       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 14       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 14       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 14       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 14       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.36          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 18       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 18       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 18       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 18       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.36          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD11 | 3        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD12 | 3        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD13 | 3        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD11 | 6        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD12 | 6        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD13 | 6        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD11 | 9        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD12 | 9        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD13 | 9        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD11 | 14       | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD12 | 14       | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD13 | 14       | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.36          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD11 | 15       | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD12 | 15       | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD13 | 15       | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.36          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.36          |
| (1,97) | 1:A:3:ARG:H  | 1:A:4:LEU:HA    | 2        | 0.36          |
| (1,97) | 1:A:3:ARG:H  | 1:A:4:LEU:HA    | 13       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11  | 3        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12  | 3        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13  | 3        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21  | 3        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22  | 3        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23  | 3        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11  | 4        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12  | 4        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13  | 4        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21  | 4        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22  | 4        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23  | 4        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11  | 6        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12  | 6        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13  | 6        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21  | 6        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22  | 6        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23  | 6        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11  | 7        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12  | 7        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13  | 7        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21  | 7        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22  | 7        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23  | 7        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11  | 8        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12  | 8        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13  | 8        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21  | 8        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22  | 8        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23  | 8        | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11  | 10       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12  | 10       | 0.36          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1       | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|--------------|----------------|----------|---------------|
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 10       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 10       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 10       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 10       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 11       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 11       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 11       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 11       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 11       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 11       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 15       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 15       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 15       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 15       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 15       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 15       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 16       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 16       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 16       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 16       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 16       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 16       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 18       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 18       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 18       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 18       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 18       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 18       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 20       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 20       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 20       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 20       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 20       | 0.36          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 20       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 3        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 3        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 3        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 3        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 3        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 3        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 4        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 4        | 0.36          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1       | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|--------------|----------------|----------|---------------|
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 4        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 4        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 4        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 4        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 6        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 6        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 6        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 6        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 6        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 6        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 7        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 7        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 7        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 7        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 7        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 7        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 8        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 8        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 8        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 8        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 8        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 8        | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 10       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 10       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 10       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 10       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 10       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 10       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 11       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 11       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 11       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 11       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 11       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 11       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 15       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 15       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 15       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 15       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 15       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 15       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 16       | 0.36          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 16       | 0.36          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD13 | 16       | 0.36          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD21 | 16       | 0.36          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD22 | 16       | 0.36          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD23 | 16       | 0.36          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD11 | 18       | 0.36          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD12 | 18       | 0.36          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD13 | 18       | 0.36          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD21 | 18       | 0.36          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD22 | 18       | 0.36          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD23 | 18       | 0.36          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD11 | 20       | 0.36          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD12 | 20       | 0.36          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD13 | 20       | 0.36          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD21 | 20       | 0.36          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD22 | 20       | 0.36          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD23 | 20       | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:16:LYS:H   | 1        | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:16:LYS:H   | 1        | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:16:LYS:H   | 2        | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:16:LYS:H   | 2        | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:16:LYS:H   | 6        | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:16:LYS:H   | 6        | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:16:LYS:H   | 7        | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:16:LYS:H   | 7        | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:16:LYS:H   | 12       | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:16:LYS:H   | 12       | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:16:LYS:H   | 13       | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:16:LYS:H   | 13       | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:16:LYS:H   | 14       | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:16:LYS:H   | 14       | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:16:LYS:H   | 16       | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:16:LYS:H   | 16       | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:16:LYS:H   | 17       | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:16:LYS:H   | 17       | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:16:LYS:H   | 18       | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:16:LYS:H   | 18       | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.36          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.36          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA   | 15       | 0.36          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA   | 15       | 0.36          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 1        | 0.36          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 2        | 0.36          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 3        | 0.36          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 5        | 0.36          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 6        | 0.36          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 7        | 0.36          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 9        | 0.36          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 10       | 0.36          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 12       | 0.36          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 13       | 0.36          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 14       | 0.36          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 16       | 0.36          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 17       | 0.36          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 18       | 0.36          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 19       | 0.36          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 20       | 0.36          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H    | 4        | 0.36          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H    | 4        | 0.36          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB2 | 1:A:16:LYS:H    | 8        | 0.36          |
| (1,673) | 1:A:14:GLN:HB3 | 1:A:16:LYS:H    | 8        | 0.36          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 5        | 0.36          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H    | 5        | 0.36          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 15       | 0.36          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 15       | 0.36          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HA   | 12       | 0.36          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HA   | 12       | 0.36          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1        | 0.36          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1        | 0.36          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1        | 0.36          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 3        | 0.36          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 3        | 0.36          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 3        | 0.36          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 7        | 0.36          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 7        | 0.36          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 7        | 0.36          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 11       | 0.36          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 11       | 0.36          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 11       | 0.36          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 20       | 0.36          |
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 20       | 0.36          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,533) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 20       | 0.36          |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA   | 1        | 0.36          |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA   | 3        | 0.36          |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA   | 6        | 0.36          |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA   | 7        | 0.36          |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA   | 12       | 0.36          |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA   | 18       | 0.36          |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA   | 19       | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 1        | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 1        | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 2        | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 2        | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 3        | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 3        | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 5        | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 5        | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 6        | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 6        | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 7        | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 7        | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 9        | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 9        | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 10       | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 10       | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 11       | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 11       | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 13       | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 13       | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 14       | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 14       | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 16       | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 16       | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 17       | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 17       | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 18       | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 18       | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 19       | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 19       | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 20       | 0.36          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 20       | 0.36          |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:H    | 15       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1        | 0.36          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 1        | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 2        | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 2        | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 3        | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 3        | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 5        | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 5        | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 6        | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 6        | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 7        | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 7        | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 9        | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 9        | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 10       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 10       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 11       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 11       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 12       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 12       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 13       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 13       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 14       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 14       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 15       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 15       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 16       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 17       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 17       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 19       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 19       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.36          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.36          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ   | 4        | 0.36          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ   | 8        | 0.36          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ   | 12       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 2        | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 2        | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 2        | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 2        | 0.36          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 3        | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 3        | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 3        | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 3        | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 6        | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 6        | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 6        | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 6        | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 7        | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 7        | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 7        | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 7        | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 9        | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 9        | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 9        | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 9        | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 10       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 10       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 10       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 10       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 11       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 11       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 11       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 11       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 12       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 12       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 12       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 12       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 13       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 13       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 13       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 13       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 14       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 14       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 14       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 14       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 17       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 17       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2 | 17       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3 | 17       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2 | 18       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3 | 18       | 0.36          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 18       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 18       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2  | 19       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3  | 19       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 19       | 0.36          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 19       | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 1        | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 1        | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 1        | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 1        | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 1        | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 1        | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 1        | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 1        | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 1        | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 1        | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 1        | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 1        | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 18       | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 18       | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 18       | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 18       | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 18       | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 18       | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 18       | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 18       | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 18       | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21  | 18       | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22  | 18       | 0.36          |
| (1,36)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23  | 18       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.36          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.36          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.36          |
| (1,356) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.36          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.36          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.36          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.36          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.36          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.36          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.36          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.36          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.36          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.36          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.36          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.36          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.36          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA  | 1        | 0.36          |
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA  | 5        | 0.36          |
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA  | 9        | 0.36          |
| (1,350) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HA  | 15       | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 1        | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 1        | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 1        | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 1        | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 1        | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 1        | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 1        | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 1        | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 1        | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 1        | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 1        | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 1        | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 18       | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 18       | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 18       | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 18       | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 18       | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 18       | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 18       | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 18       | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 18       | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 18       | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 18       | 0.36          |
| (1,33)  | 1:A:2:MET:HG3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 18       | 0.36          |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 1        | 0.36          |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 2        | 0.36          |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 3        | 0.36          |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 5        | 0.36          |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 6        | 0.36          |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 7        | 0.36          |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 9        | 0.36          |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 10       | 0.36          |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 11       | 0.36          |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 13       | 0.36          |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 14       | 0.36          |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 15       | 0.36          |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 16       | 0.36          |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H   | 17       | 0.36          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H  | 18       | 0.36          |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H  | 19       | 0.36          |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H  | 20       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2 | 2        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3 | 2        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2 | 2        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3 | 2        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2 | 3        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3 | 3        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2 | 3        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3 | 3        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2 | 5        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3 | 5        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2 | 5        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3 | 5        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2 | 6        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3 | 6        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2 | 6        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3 | 6        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2 | 7        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3 | 7        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2 | 7        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3 | 7        | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2 | 10       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3 | 10       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2 | 10       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3 | 10       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2 | 11       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3 | 11       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2 | 11       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3 | 11       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2 | 13       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3 | 13       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2 | 13       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3 | 13       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2 | 15       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3 | 15       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2 | 15       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3 | 15       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2 | 16       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3 | 16       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2 | 16       | 0.36          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3 | 16       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2 | 18       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3 | 18       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2 | 18       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3 | 18       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2 | 19       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3 | 19       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2 | 19       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3 | 19       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG2 | 20       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:9:ARG:HG3 | 20       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG2 | 20       | 0.36          |
| (1,313) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:9:ARG:HG3 | 20       | 0.36          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.36          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.36          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.36          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.36          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 8        | 0.36          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 8        | 0.36          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 8        | 0.36          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 8        | 0.36          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA  | 2        | 0.36          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA  | 4        | 0.36          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA  | 8        | 0.36          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA  | 9        | 0.36          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA  | 10       | 0.36          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA  | 11       | 0.36          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA  | 12       | 0.36          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA  | 13       | 0.36          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA  | 14       | 0.36          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA  | 17       | 0.36          |
| (1,282) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HA  | 19       | 0.36          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 15       | 0.36          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 14       | 0.36          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 14       | 0.36          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 14       | 0.36          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 14       | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.36          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.36          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.36          |
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:H   | 9        | 0.36          |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:H   | 14       | 0.36          |
| (1,185) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:H   | 19       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ  | 2        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ  | 2        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ  | 2        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ  | 2        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ  | 2        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ  | 2        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ  | 3        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ  | 3        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ  | 3        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ  | 3        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ  | 3        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ  | 3        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ  | 6        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ  | 6        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ  | 6        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ  | 6        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ  | 6        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ  | 6        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ  | 7        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ  | 7        | 0.36          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|--------------|----------|---------------|
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 7        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 7        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 7        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 7        | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 10       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 10       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 10       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 10       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 10       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 10       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 11       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 11       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 11       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 11       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 11       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 11       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 12       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 12       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 12       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 12       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 12       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 12       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 13       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 13       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 13       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 13       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 13       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 13       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 14       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 14       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 14       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 14       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 14       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 14       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 15       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 15       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 15       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 15       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 15       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 15       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 16       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 16       | 0.36          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|--------------|----------|---------------|
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 16       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 16       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 16       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 16       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 17       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 17       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 17       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 17       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 17       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 17       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 18       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 18       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 18       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 18       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 18       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 18       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 19       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 19       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 19       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 19       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 19       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 19       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 20       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 20       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 20       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 20       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 20       | 0.36          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 20       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 2        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 2        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 2        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 2        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 2        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 2        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 3        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 3        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 3        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 3        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 3        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 3        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 6        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 6        | 0.36          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|--------------|----------|---------------|
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 6        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 6        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 6        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 6        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 7        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 7        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 7        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 7        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 7        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 7        | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 10       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 10       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 10       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 10       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 10       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 10       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 11       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 11       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 11       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 11       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 11       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 11       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 12       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 12       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 12       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 12       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 12       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 12       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 13       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 13       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 13       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 13       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 13       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 13       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 14       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 14       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ | 14       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ | 14       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ | 14       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ | 14       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ | 15       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ | 15       | 0.36          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ    | 15       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ    | 15       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ    | 15       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ    | 15       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ    | 16       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ    | 16       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ    | 16       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ    | 16       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ    | 16       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ    | 16       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ    | 17       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ    | 17       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ    | 17       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ    | 17       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ    | 17       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ    | 17       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ    | 18       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ    | 18       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ    | 18       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ    | 18       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ    | 18       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ    | 18       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ    | 19       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ    | 19       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ    | 19       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ    | 19       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ    | 19       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ    | 19       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20       | 0.36          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20       | 0.36          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG2   | 9        | 0.36          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG3   | 9        | 0.36          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG2   | 9        | 0.36          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG3   | 9        | 0.36          |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG12 | 5        | 0.35          |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG13 | 5        | 0.35          |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.35          |
| (2,5)   | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.35          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key   | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|-------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 5        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 5        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 9        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 9        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 9        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 9        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 11       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 11       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 11       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 11       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 16       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 16       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 16       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 16       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.35          |
| (2,5) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.35          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 17       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 17       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 17       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 17       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 19       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 19       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 19       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 19       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.35          |
| (2,5)  | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.35          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 4        | 0.35          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 4        | 0.35          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.35          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.35          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.35          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.35          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 4        | 0.35          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 4        | 0.35          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.35          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.35          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.35          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 1        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 1        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 1        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.35          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 2        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 2        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 2        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 3        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 3        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 3        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 5        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 5        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 5        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 6        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 6        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 6        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 7        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 7        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 7        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 9        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 9        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 9        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 10       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 10       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 10       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.35          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 11       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 11       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 11       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 12       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 12       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 12       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 13       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 13       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 13       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 14       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 14       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 14       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 15       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 15       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 15       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 16       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 16       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 16       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 17       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 17       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 17       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.35          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 18       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 18       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 18       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 19       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 19       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 19       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 20       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 20       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 20       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.35          |
| (2,18) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD11 | 2        | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD12 | 2        | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD13 | 2        | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD11 | 5        | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD12 | 5        | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD13 | 5        | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD11 | 7        | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD12 | 7        | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD13 | 7        | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD11 | 10       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD12 | 10       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD13 | 10       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.35          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD11 | 11       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD12 | 11       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD13 | 11       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD11 | 12       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD12 | 12       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD13 | 12       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD11 | 13       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD12 | 13       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD13 | 13       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD11 | 16       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD12 | 16       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD13 | 16       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD11 | 17       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD12 | 17       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD13 | 17       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD11 | 18       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD12 | 18       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD13 | 18       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD11 | 20       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD12 | 20       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HD13 | 20       | 0.35          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.35          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,15)  | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.35          |
| (2,15)  | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.35          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HB2   | 9        | 0.35          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HB3   | 9        | 0.35          |
| (1,97)  | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HA    | 5        | 0.35          |
| (1,97)  | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HA    | 14       | 0.35          |
| (1,97)  | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HA    | 19       | 0.35          |
| (1,87)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD11  | 1        | 0.35          |
| (1,87)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD12  | 1        | 0.35          |
| (1,87)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD13  | 1        | 0.35          |
| (1,87)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD21  | 1        | 0.35          |
| (1,87)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD22  | 1        | 0.35          |
| (1,87)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD23  | 1        | 0.35          |
| (1,87)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD11  | 12       | 0.35          |
| (1,87)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD12  | 12       | 0.35          |
| (1,87)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD13  | 12       | 0.35          |
| (1,87)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD21  | 12       | 0.35          |
| (1,87)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD22  | 12       | 0.35          |
| (1,87)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD23  | 12       | 0.35          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD11  | 1        | 0.35          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD12  | 1        | 0.35          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD13  | 1        | 0.35          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD21  | 1        | 0.35          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD22  | 1        | 0.35          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD23  | 1        | 0.35          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD11  | 12       | 0.35          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD12  | 12       | 0.35          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD13  | 12       | 0.35          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD21  | 12       | 0.35          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD22  | 12       | 0.35          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD23  | 12       | 0.35          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 3        | 0.35          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 3        | 0.35          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 9        | 0.35          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 9        | 0.35          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 10       | 0.35          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 10       | 0.35          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 15       | 0.35          |
| (1,730) | 1:A:16:LYS:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 15       | 0.35          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA   | 4        | 0.35          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA   | 4        | 0.35          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA   | 8        | 0.35          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA | 8        | 0.35          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H  | 11       | 0.35          |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H  | 4        | 0.35          |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H  | 8        | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H  | 1        | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H  | 1        | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H  | 3        | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H  | 3        | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H  | 6        | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H  | 6        | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H  | 7        | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H  | 7        | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H  | 9        | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H  | 9        | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H  | 11       | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H  | 11       | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H  | 12       | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H  | 12       | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H  | 14       | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H  | 14       | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H  | 16       | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H  | 16       | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H  | 18       | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H  | 18       | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H  | 19       | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H  | 19       | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H  | 20       | 0.35          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H  | 20       | 0.35          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H  | 11       | 0.35          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H  | 11       | 0.35          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HA | 4        | 0.35          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HA | 4        | 0.35          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HA | 8        | 0.35          |
| (1,543) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HA | 8        | 0.35          |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HA | 3        | 0.35          |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HA | 9        | 0.35          |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HA | 10       | 0.35          |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HA | 13       | 0.35          |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HA | 15       | 0.35          |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HA | 17       | 0.35          |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HA | 18       | 0.35          |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HA | 20       | 0.35          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA | 2        | 0.35          |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA | 5        | 0.35          |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA | 9        | 0.35          |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA | 10       | 0.35          |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA | 11       | 0.35          |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA | 13       | 0.35          |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA | 14       | 0.35          |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA | 16       | 0.35          |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA | 17       | 0.35          |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA | 20       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 1        | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 1        | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 2        | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 2        | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 3        | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 3        | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 5        | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 5        | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 6        | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 6        | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 7        | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 7        | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 9        | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 9        | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 10       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 10       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 11       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 11       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 12       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 12       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 13       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 13       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 14       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 14       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 15       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 15       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 16       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 16       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 17       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 17       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 18       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 18       | 0.35          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 19       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 19       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB  | 20       | 0.35          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB  | 20       | 0.35          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H   | 15       | 0.35          |
| (1,498) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H   | 15       | 0.35          |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:H   | 4        | 0.35          |
| (1,496) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:H   | 8        | 0.35          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HB2 | 4        | 0.35          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HB3 | 4        | 0.35          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HB2 | 8        | 0.35          |
| (1,468) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HB3 | 8        | 0.35          |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HA  | 15       | 0.35          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:10:ASP:H   | 4        | 0.35          |
| (1,392) | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:10:ASP:H   | 8        | 0.35          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HZ   | 1        | 0.35          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HZ   | 2        | 0.35          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HZ   | 3        | 0.35          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HZ   | 5        | 0.35          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HZ   | 6        | 0.35          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HZ   | 7        | 0.35          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HZ   | 9        | 0.35          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HZ   | 10       | 0.35          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HZ   | 11       | 0.35          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HZ   | 13       | 0.35          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HZ   | 14       | 0.35          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HZ   | 15       | 0.35          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HZ   | 16       | 0.35          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HZ   | 17       | 0.35          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HZ   | 18       | 0.35          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HZ   | 19       | 0.35          |
| (1,384) | 1:A:8:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HZ   | 20       | 0.35          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HG2 | 1        | 0.35          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HG3 | 1        | 0.35          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HG2 | 1        | 0.35          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HG3 | 1        | 0.35          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HG2 | 5        | 0.35          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HG3 | 5        | 0.35          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HG2 | 5        | 0.35          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HG3 | 5        | 0.35          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HG2 | 15       | 0.35          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HG3 | 15       | 0.35          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 15       | 0.35          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 15       | 0.35          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2  | 16       | 0.35          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3  | 16       | 0.35          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 16       | 0.35          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 16       | 0.35          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG2  | 20       | 0.35          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HG3  | 20       | 0.35          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG2  | 20       | 0.35          |
| (1,366) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HG3  | 20       | 0.35          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.35          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.35          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.35          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.35          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.35          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.35          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.35          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.35          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.35          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.35          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.35          |
| (1,354) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.35          |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H    | 4        | 0.35          |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H    | 8        | 0.35          |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H    | 4        | 0.35          |
| (1,324) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:10:ASP:H    | 8        | 0.35          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2   | 4        | 0.35          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3   | 4        | 0.35          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2   | 8        | 0.35          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3   | 8        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2   | 1        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3   | 1        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2   | 1        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3   | 1        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2   | 2        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3   | 2        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2   | 2        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3   | 2        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2   | 3        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3   | 3        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2   | 3        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3   | 3        | 0.35          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.35          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.35          |
| (1,294) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 1        | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 1        | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 2        | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 2        | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 3        | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 3        | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 5        | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 5        | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 6        | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 6        | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 7        | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 7        | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 9        | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 9        | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 10       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 10       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 11       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 11       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 12       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 12       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 13       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 13       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 14       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 14       | 0.35          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 15       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 15       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 16       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 16       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 17       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 17       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 18       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 18       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 19       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 19       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 20       | 0.35          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 20       | 0.35          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 2        | 0.35          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 2        | 0.35          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 2        | 0.35          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 2        | 0.35          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 5        | 0.35          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 5        | 0.35          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 5        | 0.35          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 5        | 0.35          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 13       | 0.35          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 13       | 0.35          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 13       | 0.35          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 13       | 0.35          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 19       | 0.35          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 19       | 0.35          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 19       | 0.35          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 19       | 0.35          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 2        | 0.35          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 2        | 0.35          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.35          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.35          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.35          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.35          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.35          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.35          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.35          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.35          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.35          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.35          |
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:H   | 2        | 0.35          |
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:H   | 5        | 0.35          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:H     | 13       | 0.35          |
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:H     | 14       | 0.35          |
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:H     | 17       | 0.35          |
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:H     | 19       | 0.35          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ    | 1        | 0.35          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ    | 1        | 0.35          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ    | 1        | 0.35          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ    | 1        | 0.35          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ    | 1        | 0.35          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ    | 1        | 0.35          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ    | 5        | 0.35          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ    | 5        | 0.35          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ    | 5        | 0.35          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ    | 5        | 0.35          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ    | 5        | 0.35          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ    | 5        | 0.35          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ    | 1        | 0.35          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ    | 1        | 0.35          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ    | 1        | 0.35          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ    | 1        | 0.35          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ    | 1        | 0.35          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ    | 1        | 0.35          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ    | 5        | 0.35          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ    | 5        | 0.35          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ    | 5        | 0.35          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ    | 5        | 0.35          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ    | 5        | 0.35          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ    | 5        | 0.35          |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O    | 1:A:13:LEU:N    | 4        | 0.34          |
| (3,8)   | 1:A:9:ARG:O    | 1:A:13:LEU:N    | 8        | 0.34          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG12 | 2        | 0.34          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG13 | 2        | 0.34          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.34          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.34          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.34          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.34          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG12 | 5        | 0.34          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG13 | 5        | 0.34          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.34          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.34          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.34          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.34          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key   | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|-------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG12 | 7        | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG13 | 7        | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG12 | 10       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG13 | 10       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG12 | 15       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG13 | 15       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG12 | 19       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG13 | 19       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG12 | 20       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG13 | 20       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.34          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.34          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 2        | 0.34          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 2        | 0.34          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.34          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.34          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.34          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.34          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 2        | 0.34          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 2        | 0.34          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.34          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.34          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.34          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.34          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 10       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 10       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 10       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 10       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 15       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 15       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 15       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 15       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 20       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 20       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 20       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 20       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.34          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.34          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 4        | 0.34          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 4        | 0.34          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 4        | 0.34          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.34          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.34          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.34          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,21)  | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 8        | 0.34          |
| (2,21)  | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 8        | 0.34          |
| (2,21)  | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 8        | 0.34          |
| (2,21)  | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.34          |
| (2,21)  | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.34          |
| (2,21)  | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.34          |
| (2,18)  | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 4        | 0.34          |
| (2,18)  | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 4        | 0.34          |
| (2,18)  | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 4        | 0.34          |
| (2,18)  | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.34          |
| (2,18)  | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.34          |
| (2,18)  | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.34          |
| (2,18)  | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 8        | 0.34          |
| (2,18)  | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 8        | 0.34          |
| (2,18)  | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 8        | 0.34          |
| (2,18)  | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.34          |
| (2,18)  | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.34          |
| (2,18)  | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.34          |
| (2,15)  | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:12:ILE:HD11 | 19       | 0.34          |
| (2,15)  | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:12:ILE:HD12 | 19       | 0.34          |
| (2,15)  | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:12:ILE:HD13 | 19       | 0.34          |
| (2,15)  | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.34          |
| (2,15)  | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.34          |
| (2,15)  | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.34          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 12       | 0.34          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 12       | 0.34          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 13       | 0.34          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 13       | 0.34          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 14       | 0.34          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 14       | 0.34          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 12       | 0.34          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 12       | 0.34          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 13       | 0.34          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 13       | 0.34          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 14       | 0.34          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 14       | 0.34          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA    | 14       | 0.34          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA  | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.34          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA  | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.34          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 2        | 0.34          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H    | 2        | 0.34          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H    | 10       | 0.34          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H  | 10       | 0.34          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H  | 13       | 0.34          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H  | 13       | 0.34          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:14:GLN:H  | 17       | 0.34          |
| (1,557) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:14:GLN:H  | 17       | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H  | 1        | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H  | 1        | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H  | 2        | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H  | 2        | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H  | 3        | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H  | 3        | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H  | 5        | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H  | 5        | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H  | 6        | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H  | 6        | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H  | 7        | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H  | 7        | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H  | 9        | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H  | 9        | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H  | 10       | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H  | 10       | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H  | 12       | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H  | 12       | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H  | 13       | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H  | 13       | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H  | 14       | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H  | 14       | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H  | 16       | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H  | 16       | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H  | 17       | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H  | 17       | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H  | 18       | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H  | 18       | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H  | 19       | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H  | 19       | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:14:GLN:H  | 20       | 0.34          |
| (1,556) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:14:GLN:H  | 20       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 1        | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 1        | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 2        | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 2        | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 3        | 0.34          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 3        | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 5        | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 5        | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 6        | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 6        | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 7        | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 7        | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 9        | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 9        | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 10       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 10       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 11       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 11       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 12       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 12       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 13       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 13       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 14       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 14       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 15       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 15       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 16       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 16       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 17       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 17       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 18       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 18       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 19       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 19       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 20       | 0.34          |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 20       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 1        | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 1        | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 2        | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 2        | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 3        | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 3        | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 5        | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 5        | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 6        | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 6        | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 7        | 0.34          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 7        | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 9        | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 9        | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 10       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 10       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 11       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 11       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 12       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 12       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 13       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 13       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 14       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 14       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 15       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 15       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 16       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 16       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 17       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 17       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 18       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 18       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 19       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 19       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA | 20       | 0.34          |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA | 20       | 0.34          |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HA | 1        | 0.34          |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HA | 2        | 0.34          |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HA | 5        | 0.34          |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HA | 6        | 0.34          |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HA | 7        | 0.34          |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HA | 12       | 0.34          |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HA | 14       | 0.34          |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HA | 16       | 0.34          |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HA | 19       | 0.34          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:11:PHE:HA | 4        | 0.34          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:11:PHE:HA | 4        | 0.34          |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HA | 1        | 0.34          |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HA | 2        | 0.34          |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HA | 3        | 0.34          |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HA | 5        | 0.34          |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HA | 6        | 0.34          |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HA | 7        | 0.34          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:11:PHE:HA | 9        | 0.34          |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:11:PHE:HA | 10       | 0.34          |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:11:PHE:HA | 11       | 0.34          |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:11:PHE:HA | 12       | 0.34          |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:11:PHE:HA | 13       | 0.34          |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:11:PHE:HA | 14       | 0.34          |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:11:PHE:HA | 16       | 0.34          |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:11:PHE:HA | 17       | 0.34          |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:11:PHE:HA | 18       | 0.34          |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:11:PHE:HA | 19       | 0.34          |
| (1,444) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:11:PHE:HA | 20       | 0.34          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.34          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.34          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.34          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 8        | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 8        | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.34          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.34          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 8        | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 8        | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.34          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.34          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 4        | 0.34          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 4        | 0.34          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:7:PHE:H   | 8        | 0.34          |
| (1,280) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:7:PHE:H   | 8        | 0.34          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 4        | 0.34          |
| (1,274) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:7:PHE:HZ  | 8        | 0.34          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.34          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.34          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 8        | 0.34          |
| (1,240) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 8        | 0.34          |
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:H   | 1        | 0.34          |
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:H   | 3        | 0.34          |
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:H   | 4        | 0.34          |
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:H   | 6        | 0.34          |
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:H   | 7        | 0.34          |
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:H   | 8        | 0.34          |
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:H   | 10       | 0.34          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:H     | 11       | 0.34          |
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:H     | 12       | 0.34          |
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:H     | 15       | 0.34          |
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:H     | 16       | 0.34          |
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:H     | 18       | 0.34          |
| (1,208) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:H     | 20       | 0.34          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 4        | 0.34          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 8        | 0.34          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ    | 9        | 0.34          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ    | 9        | 0.34          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ    | 9        | 0.34          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ    | 9        | 0.34          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ    | 9        | 0.34          |
| (1,182) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ    | 9        | 0.34          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:7:PHE:HZ    | 9        | 0.34          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:7:PHE:HZ    | 9        | 0.34          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:7:PHE:HZ    | 9        | 0.34          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:7:PHE:HZ    | 9        | 0.34          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:7:PHE:HZ    | 9        | 0.34          |
| (1,177) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:7:PHE:HZ    | 9        | 0.34          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 1        | 0.34          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 3        | 0.34          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 4        | 0.34          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 6        | 0.34          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 7        | 0.34          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 8        | 0.34          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 10       | 0.34          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 11       | 0.34          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 12       | 0.34          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 15       | 0.34          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 16       | 0.34          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 17       | 0.34          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 18       | 0.34          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 20       | 0.34          |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O   | 1:A:14:GLN:H    | 11       | 0.33          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG12 | 1        | 0.33          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG13 | 1        | 0.33          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.33          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.33          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.33          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.33          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG12 | 6        | 0.33          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key   | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|-------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG13 | 6        | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG12 | 9        | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG13 | 9        | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG12 | 12       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG13 | 12       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG12 | 14       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG13 | 14       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG12 | 16       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG13 | 16       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG12 | 17       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG13 | 17       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.33          |
| (2,7) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.33          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 1        | 0.33          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 1        | 0.33          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.33          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.33          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.33          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.33          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 1        | 0.33          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 1        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 6        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 6        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 6        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 6        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 7        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 7        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 7        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 7        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 12       | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 12       | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 12       | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 12       | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.33          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.33          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 4        | 0.33          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,27)  | 1:A:11:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HG13 | 4        | 0.33          |
| (2,27)  | 1:A:11:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.33          |
| (2,27)  | 1:A:11:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.33          |
| (2,27)  | 1:A:11:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.33          |
| (2,27)  | 1:A:11:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.33          |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H    | 15       | 0.33          |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H    | 15       | 0.33          |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA   | 4        | 0.33          |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA   | 4        | 0.33          |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA   | 8        | 0.33          |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA   | 8        | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 1        | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 1        | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 2        | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 2        | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 3        | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 3        | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 6        | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 6        | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 7        | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 7        | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 9        | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 9        | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 10       | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 10       | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 16       | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 16       | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 17       | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 17       | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 18       | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 18       | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 20       | 0.33          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 20       | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 1        | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 1        | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 2        | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 2        | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 3        | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 3        | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 6        | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 6        | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 7        | 0.33          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H  | 7        | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H  | 9        | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H  | 9        | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H  | 10       | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H  | 10       | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H  | 16       | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H  | 16       | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H  | 17       | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H  | 17       | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H  | 18       | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H  | 18       | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H  | 20       | 0.33          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H  | 20       | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA | 2        | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA | 2        | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA | 3        | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA | 3        | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA | 9        | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA | 9        | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA | 10       | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA | 10       | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA | 13       | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA | 13       | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA | 14       | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA | 14       | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA | 16       | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA | 16       | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA | 17       | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA | 17       | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA | 18       | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA | 18       | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA | 20       | 0.33          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA | 20       | 0.33          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA  | 3        | 0.33          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA  | 5        | 0.33          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA  | 20       | 0.33          |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H  | 2        | 0.33          |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H  | 3        | 0.33          |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H  | 6        | 0.33          |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H  | 9        | 0.33          |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H  | 10       | 0.33          |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H  | 13       | 0.33          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H  | 14       | 0.33          |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H  | 16       | 0.33          |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H  | 17       | 0.33          |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H  | 18       | 0.33          |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H  | 20       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 1        | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 1        | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 2        | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 2        | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 3        | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 3        | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 5        | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 5        | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 6        | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 6        | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 7        | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 7        | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 9        | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 9        | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 10       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 10       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 11       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 11       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 12       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 12       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 13       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 13       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 14       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 14       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 15       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 15       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 16       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 16       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 17       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 17       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 18       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 18       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 19       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 19       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB | 20       | 0.33          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB | 20       | 0.33          |
| (1,53)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HA  | 9        | 0.33          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HA  | 11       | 0.33          |
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HA  | 15       | 0.33          |
| (1,505) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HB2 | 4        | 0.33          |
| (1,505) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HB3 | 4        | 0.33          |
| (1,505) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HB2 | 8        | 0.33          |
| (1,505) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:13:LEU:HB3 | 8        | 0.33          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 8        | 0.33          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 8        | 0.33          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 15       | 0.33          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 15       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 2        | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 2        | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 3        | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 3        | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 5        | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 5        | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 6        | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 6        | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 7        | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 7        | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 9        | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 9        | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 10       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 10       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 11       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 11       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 13       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 13       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 14       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 14       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 15       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 15       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 16       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 16       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 17       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 17       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 18       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 18       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 19       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 19       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB2  | 20       | 0.33          |
| (1,306) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HB3  | 20       | 0.33          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.33          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.33          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 2        | 0.33          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 2        | 0.33          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.33          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.33          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.33          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.33          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.33          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.33          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.33          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.33          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.33          |
| (1,284) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.33          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.33          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.33          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 2        | 0.33          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 2        | 0.33          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.33          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.33          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.33          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.33          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.33          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.33          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.33          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.33          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.33          |
| (1,283) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.33          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HA  | 1        | 0.33          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HA  | 1        | 0.33          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HA  | 1        | 0.33          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HA  | 12       | 0.33          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HA  | 12       | 0.33          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HA  | 12       | 0.33          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 9        | 0.33          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 9        | 0.33          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 9        | 0.33          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 9        | 0.33          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 17       | 0.33          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 17       | 0.33          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 17       | 0.33          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 17       | 0.33          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H     | 2        | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H     | 2        | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H     | 2        | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H     | 2        | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H     | 2        | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H     | 2        | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H     | 5        | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H     | 5        | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H     | 5        | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H     | 5        | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H     | 5        | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H     | 5        | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H     | 14       | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H     | 14       | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H     | 14       | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H     | 14       | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H     | 14       | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H     | 14       | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H     | 19       | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H     | 19       | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H     | 19       | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H     | 19       | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H     | 19       | 0.33          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H     | 19       | 0.33          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 2        | 0.33          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 5        | 0.33          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 9        | 0.33          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 13       | 0.33          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 14       | 0.33          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 17       | 0.33          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 19       | 0.33          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 2        | 0.33          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 5        | 0.33          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 9        | 0.33          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 13       | 0.33          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 14       | 0.33          |
| (1,127) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HG    | 19       | 0.33          |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O   | 1:A:14:GLN:H    | 9        | 0.32          |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O   | 1:A:14:GLN:H    | 17       | 0.32          |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O   | 1:A:14:GLN:H    | 18       | 0.32          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG12 | 3        | 0.32          |
| (2,7)   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG13 | 3        | 0.32          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG12 | 11       | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG13 | 11       | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG12 | 13       | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG13 | 13       | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG12 | 18       | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG13 | 18       | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.32          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.32          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.32          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.32          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.32          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.32          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.32          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.32          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.32          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.32          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.32          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.32          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.32          |
| (2,35) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD11 | 1        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD12 | 1        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD13 | 1        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD11 | 2        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HD12 | 2        | 0.32          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 2        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 3        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 3        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 3        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 5        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 5        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 5        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 6        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 6        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 6        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 7        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 7        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 7        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 9        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 9        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 9        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 10       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 10       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 10       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 11       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 11       | 0.32          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 11       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 12       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 12       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 12       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 13       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 13       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 13       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 14       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 14       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 14       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 15       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 15       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 15       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 16       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 16       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 16       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 17       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 17       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 17       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 18       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 18       | 0.32          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 18       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 19       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 19       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 19       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 20       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 20       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 20       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.32          |
| (2,21) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.32          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD11 | 4        | 0.32          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD12 | 4        | 0.32          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD13 | 4        | 0.32          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.32          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.32          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.32          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD11 | 8        | 0.32          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD12 | 8        | 0.32          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HD13 | 8        | 0.32          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.32          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.32          |
| (2,15) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.32          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD11  | 5        | 0.32          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD12  | 5        | 0.32          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD13  | 5        | 0.32          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD21  | 5        | 0.32          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD22  | 5        | 0.32          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD23  | 5        | 0.32          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD11  | 17       | 0.32          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD12  | 17       | 0.32          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD13  | 17       | 0.32          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD21  | 17       | 0.32          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD22  | 17       | 0.32          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD23  | 17       | 0.32          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD11  | 5        | 0.32          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD12  | 5        | 0.32          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD13 | 5        | 0.32          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD21 | 5        | 0.32          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD22 | 5        | 0.32          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD23 | 5        | 0.32          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD11 | 17       | 0.32          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD12 | 17       | 0.32          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD13 | 17       | 0.32          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD21 | 17       | 0.32          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD22 | 17       | 0.32          |
| (1,86)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD23 | 17       | 0.32          |
| (1,84)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HA   | 2        | 0.32          |
| (1,84)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HA   | 13       | 0.32          |
| (1,84)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HA   | 17       | 0.32          |
| (1,84)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HA   | 19       | 0.32          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.32          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.32          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.32          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.32          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.32          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H   | 5        | 0.32          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.32          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.32          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA  | 1        | 0.32          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA  | 1        | 0.32          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA  | 5        | 0.32          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA  | 5        | 0.32          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA  | 6        | 0.32          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA  | 6        | 0.32          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA  | 7        | 0.32          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA  | 7        | 0.32          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA  | 12       | 0.32          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA  | 12       | 0.32          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB2 | 1:A:16:LYS:HA  | 19       | 0.32          |
| (1,708) | 1:A:15:ARG:HB3 | 1:A:16:LYS:HA  | 19       | 0.32          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H   | 4        | 0.32          |
| (1,707) | 1:A:15:ARG:HA  | 1:A:16:LYS:H   | 8        | 0.32          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA   | 2        | 0.32          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA   | 11       | 0.32          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA   | 15       | 0.32          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA   | 16       | 0.32          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA   | 17       | 0.32          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA   | 19       | 0.32          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2 | 1:A:17:LYS:HA   | 4        | 0.32          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3 | 1:A:17:LYS:HA   | 4        | 0.32          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2 | 1:A:17:LYS:HA   | 8        | 0.32          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3 | 1:A:17:LYS:HA   | 8        | 0.32          |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 1        | 0.32          |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 5        | 0.32          |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 7        | 0.32          |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 12       | 0.32          |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 19       | 0.32          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB2  | 11       | 0.32          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB3  | 11       | 0.32          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.32          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.32          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.32          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.32          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.32          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.32          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.32          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 2        | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 2        | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 3        | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 3        | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 5        | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 5        | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 6        | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 6        | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 7        | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 7        | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 9        | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 9        | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 10       | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 10       | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 13       | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 13       | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 14       | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 14       | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 16       | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 16       | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 17       | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 17       | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 18       | 0.32          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:14:GLN:HE22 | 18       | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:14:GLN:HE21 | 20       | 0.32          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:14:GLN:HE22 | 20       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB2  | 1        | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB3  | 1        | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB2  | 2        | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB3  | 2        | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB2  | 3        | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB3  | 3        | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB2  | 5        | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB3  | 5        | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB2  | 6        | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB3  | 6        | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB2  | 7        | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB3  | 7        | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB2  | 9        | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB3  | 9        | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB2  | 10       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB3  | 10       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB2  | 11       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB3  | 11       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB2  | 12       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB3  | 12       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB2  | 13       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB3  | 13       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB2  | 14       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB3  | 14       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB2  | 15       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB3  | 15       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB2  | 16       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB3  | 16       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB2  | 17       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB3  | 17       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB2  | 18       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB3  | 18       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB2  | 19       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB3  | 19       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB2  | 20       | 0.32          |
| (1,512) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HB3  | 20       | 0.32          |
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HA   | 1        | 0.32          |
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HA   | 2        | 0.32          |
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HA   | 3        | 0.32          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HA  | 5        | 0.32          |
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HA  | 6        | 0.32          |
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HA  | 7        | 0.32          |
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HA  | 9        | 0.32          |
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HA  | 10       | 0.32          |
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HA  | 12       | 0.32          |
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HA  | 13       | 0.32          |
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HA  | 14       | 0.32          |
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HA  | 16       | 0.32          |
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HA  | 17       | 0.32          |
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HA  | 18       | 0.32          |
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HA  | 19       | 0.32          |
| (1,511) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:13:LEU:HA  | 20       | 0.32          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HA  | 4        | 0.32          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HA  | 8        | 0.32          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 4        | 0.32          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 4        | 0.32          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 8        | 0.32          |
| (1,479) | 1:A:10:ASP:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 8        | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 1        | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 1        | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 2        | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 2        | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 3        | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 3        | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 5        | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 5        | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 6        | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 6        | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 7        | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 7        | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 9        | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 9        | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 10       | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 10       | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 11       | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 11       | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 13       | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 13       | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 14       | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 14       | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 16       | 0.32          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 16       | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 17       | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 17       | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 18       | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 18       | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 19       | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 19       | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 20       | 0.32          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 20       | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 1        | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 1        | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 2        | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 2        | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 3        | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 3        | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 4        | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 4        | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 5        | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 5        | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 7        | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 7        | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 8        | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 8        | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 10       | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 10       | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 14       | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 14       | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 15       | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 15       | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 16       | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 16       | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 17       | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 17       | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 19       | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 19       | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB2 | 20       | 0.32          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:11:PHE:HB3 | 20       | 0.32          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 4        | 0.32          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 4        | 0.32          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 4        | 0.32          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HE2 | 4        | 0.32          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HE1 | 8        | 0.32          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HE2 | 8        | 0.32          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HE1 | 8        | 0.32          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HE2 | 8        | 0.32          |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:H   | 3        | 0.32          |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:H   | 6        | 0.32          |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:H   | 10       | 0.32          |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:H   | 13       | 0.32          |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:H   | 14       | 0.32          |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:H   | 18       | 0.32          |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:H   | 20       | 0.32          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:9:ARG:HA   | 5        | 0.32          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:9:ARG:HA   | 5        | 0.32          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:9:ARG:HA   | 5        | 0.32          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:9:ARG:HA   | 7        | 0.32          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:9:ARG:HA   | 7        | 0.32          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:9:ARG:HA   | 7        | 0.32          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:9:ARG:HA   | 11       | 0.32          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:9:ARG:HA   | 11       | 0.32          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:9:ARG:HA   | 11       | 0.32          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:9:ARG:HA   | 16       | 0.32          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:9:ARG:HA   | 16       | 0.32          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:9:ARG:HA   | 16       | 0.32          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:9:ARG:HA   | 19       | 0.32          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:9:ARG:HA   | 19       | 0.32          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:9:ARG:HA   | 19       | 0.32          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:9:ARG:HA   | 20       | 0.32          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:9:ARG:HA   | 20       | 0.32          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:9:ARG:HA   | 20       | 0.32          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HB2  | 1        | 0.32          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HB3  | 1        | 0.32          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HB2  | 1        | 0.32          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HB3  | 1        | 0.32          |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:HA   | 9        | 0.32          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H    | 9        | 0.32          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H    | 9        | 0.32          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H    | 9        | 0.32          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H    | 9        | 0.32          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H    | 9        | 0.32          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H    | 9        | 0.32          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H    | 13       | 0.32          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H     | 13       | 0.32          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H     | 13       | 0.32          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H     | 13       | 0.32          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H     | 13       | 0.32          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H     | 13       | 0.32          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H     | 17       | 0.32          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H     | 17       | 0.32          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H     | 17       | 0.32          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H     | 17       | 0.32          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H     | 17       | 0.32          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H     | 17       | 0.32          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 1        | 0.32          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 3        | 0.32          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 6        | 0.32          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 7        | 0.32          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 10       | 0.32          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 11       | 0.32          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 12       | 0.32          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 15       | 0.32          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 16       | 0.32          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 18       | 0.32          |
| (1,189) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:7:PHE:HZ    | 20       | 0.32          |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O   | 1:A:14:GLN:H    | 1        | 0.31          |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O   | 1:A:14:GLN:H    | 2        | 0.31          |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O   | 1:A:14:GLN:H    | 3        | 0.31          |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O   | 1:A:14:GLN:H    | 5        | 0.31          |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O   | 1:A:14:GLN:H    | 6        | 0.31          |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O   | 1:A:14:GLN:H    | 7        | 0.31          |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O   | 1:A:14:GLN:H    | 10       | 0.31          |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O   | 1:A:14:GLN:H    | 12       | 0.31          |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O   | 1:A:14:GLN:H    | 13       | 0.31          |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O   | 1:A:14:GLN:H    | 14       | 0.31          |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O   | 1:A:14:GLN:H    | 16       | 0.31          |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O   | 1:A:14:GLN:H    | 19       | 0.31          |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O   | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.31          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG12 | 10       | 0.31          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG13 | 10       | 0.31          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.31          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.31          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.31          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.31          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG12 | 16       | 0.31          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG13 | 16       | 0.31          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.31          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.31          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.31          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.31          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG12 | 17       | 0.31          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG13 | 17       | 0.31          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.31          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.31          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.31          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.31          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG12 | 19       | 0.31          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG13 | 19       | 0.31          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.31          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.31          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.31          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2  | 12       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3  | 12       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2  | 12       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3  | 12       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2  | 12       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3  | 12       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2  | 12       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3  | 12       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2  | 12       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3  | 12       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2  | 12       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3  | 12       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2  | 19       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3  | 19       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2  | 19       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3  | 19       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2  | 19       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3  | 19       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2  | 19       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3  | 19       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2  | 19       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3  | 19       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2  | 19       | 0.31          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3  | 19       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:12:ILE:HG12 | 3        | 0.31          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key   | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|-------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 3        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 3        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 3        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 8        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 8        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 8        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 8        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 11       | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 11       | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 11       | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 11       | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 13       | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 13       | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.31          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 13       | 0.31          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 13       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 14       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 14       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 14       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 14       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 18       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 18       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 18       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 18       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.31          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.31          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD11  | 9        | 0.31          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD12  | 9        | 0.31          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD13  | 9        | 0.31          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD21  | 9        | 0.31          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD22  | 9        | 0.31          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD23  | 9        | 0.31          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD11  | 9        | 0.31          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD12  | 9        | 0.31          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD13  | 9        | 0.31          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD21  | 9        | 0.31          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD22  | 9        | 0.31          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HD23  | 9        | 0.31          |
| (1,84) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HA    | 12       | 0.31          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,84)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HA    | 14       | 0.31          |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H    | 2        | 0.31          |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H    | 2        | 0.31          |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H    | 10       | 0.31          |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H    | 10       | 0.31          |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA   | 15       | 0.31          |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA   | 15       | 0.31          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA    | 1        | 0.31          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA    | 4        | 0.31          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA    | 6        | 0.31          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA    | 7        | 0.31          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA    | 8        | 0.31          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA    | 10       | 0.31          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA    | 12       | 0.31          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA    | 13       | 0.31          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HA    | 18       | 0.31          |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 3        | 0.31          |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 3        | 0.31          |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 5        | 0.31          |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 5        | 0.31          |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 7        | 0.31          |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 7        | 0.31          |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 14       | 0.31          |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 14       | 0.31          |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 19       | 0.31          |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 19       | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB2  | 2        | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB3  | 2        | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB2  | 3        | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB3  | 3        | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB2  | 6        | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB3  | 6        | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB2  | 7        | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB3  | 7        | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB2  | 9        | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB3  | 9        | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB2  | 10       | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB3  | 10       | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB2  | 12       | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB3  | 12       | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB2  | 13       | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB3  | 13       | 0.31          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB2  | 16       | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB3  | 16       | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB2  | 17       | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB3  | 17       | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB2  | 18       | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB3  | 18       | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB2  | 19       | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB3  | 19       | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB2  | 20       | 0.31          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB3  | 20       | 0.31          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 1        | 0.31          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 1        | 0.31          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 12       | 0.31          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 12       | 0.31          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 19       | 0.31          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 19       | 0.31          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB   | 4        | 0.31          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB   | 4        | 0.31          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:HB   | 8        | 0.31          |
| (1,499) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:HB   | 8        | 0.31          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 15       | 0.31          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:11:PHE:HA   | 12       | 0.31          |
| (1,447) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:11:PHE:HA   | 12       | 0.31          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB2  | 9        | 0.31          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB3  | 9        | 0.31          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB2  | 11       | 0.31          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB3  | 11       | 0.31          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB2  | 12       | 0.31          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB3  | 12       | 0.31          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB2  | 13       | 0.31          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB3  | 13       | 0.31          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB2  | 18       | 0.31          |
| (1,445) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:11:PHE:HB3  | 18       | 0.31          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HE1  | 12       | 0.31          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HE2  | 12       | 0.31          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HE1  | 12       | 0.31          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HE2  | 12       | 0.31          |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:H    | 1        | 0.31          |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:H    | 2        | 0.31          |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:H    | 5        | 0.31          |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:H    | 7        | 0.31          |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:H    | 9        | 0.31          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H  | 11       | 0.31          |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H  | 12       | 0.31          |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H  | 16       | 0.31          |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H  | 17       | 0.31          |
| (1,353) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:H  | 19       | 0.31          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HA | 4        | 0.31          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HA | 4        | 0.31          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HA | 8        | 0.31          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HA | 8        | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HA  | 2        | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HA  | 2        | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HA  | 2        | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HA  | 3        | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HA  | 3        | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HA  | 3        | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HA  | 6        | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HA  | 6        | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HA  | 6        | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HA  | 9        | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HA  | 9        | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HA  | 9        | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HA  | 10       | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HA  | 10       | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HA  | 10       | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HA  | 13       | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HA  | 13       | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HA  | 13       | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HA  | 14       | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HA  | 14       | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HA  | 14       | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HA  | 15       | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HA  | 15       | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HA  | 15       | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HA  | 17       | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HA  | 17       | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HA  | 17       | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HA  | 18       | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HA  | 18       | 0.31          |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HA  | 18       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 3        | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 3        | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 3        | 0.31          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 3        | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 4        | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 4        | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 4        | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 4        | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 6        | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 6        | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 6        | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 6        | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 7        | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 7        | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 7        | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 7        | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 8        | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 8        | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 8        | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 8        | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 10       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 10       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 10       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 10       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 12       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 12       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 12       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 12       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 15       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 15       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 15       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 15       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 16       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 16       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 16       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 16       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2 | 20       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3 | 20       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2 | 20       | 0.31          |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3 | 20       | 0.31          |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 2        | 0.31          |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 3        | 0.31          |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 4        | 0.31          |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 5        | 0.31          |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HA  | 8        | 0.31          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|--------------|----------|---------------|
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:HA | 13       | 0.31          |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:HA | 14       | 0.31          |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:HA | 17       | 0.31          |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:HA | 19       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H  | 1        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H  | 1        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H  | 1        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H  | 1        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H  | 1        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H  | 1        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H  | 3        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H  | 3        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H  | 3        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H  | 3        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H  | 3        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H  | 3        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H  | 4        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H  | 4        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H  | 4        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H  | 4        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H  | 4        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H  | 4        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H  | 6        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H  | 6        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H  | 6        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H  | 6        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H  | 6        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H  | 6        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H  | 7        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H  | 7        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H  | 7        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H  | 7        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H  | 7        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H  | 7        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H  | 8        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H  | 8        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H  | 8        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H  | 8        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H  | 8        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H  | 8        | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H  | 10       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H  | 10       | 0.31          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H   | 10       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H   | 10       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H   | 10       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H   | 10       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H   | 11       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H   | 11       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H   | 11       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H   | 11       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H   | 11       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H   | 11       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H   | 12       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H   | 12       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H   | 12       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H   | 12       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H   | 12       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H   | 12       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H   | 15       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H   | 15       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H   | 15       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H   | 15       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H   | 15       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H   | 15       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H   | 16       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H   | 16       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H   | 16       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H   | 16       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H   | 16       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H   | 16       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H   | 18       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H   | 18       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H   | 18       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H   | 18       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H   | 18       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H   | 18       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:H   | 20       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:H   | 20       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:H   | 20       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:H   | 20       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:H   | 20       | 0.31          |
| (1,196) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:H   | 20       | 0.31          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG2 | 5        | 0.31          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HG3 | 5        | 0.31          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,11) | 1:A:2:MET:HA | 1:A:3:ARG:HG2   | 14       | 0.31          |
| (1,11) | 1:A:2:MET:HA | 1:A:3:ARG:HG3   | 14       | 0.31          |
| (1,10) | 1:A:2:MET:HA | 1:A:3:ARG:HG2   | 5        | 0.31          |
| (1,10) | 1:A:2:MET:HA | 1:A:3:ARG:HG3   | 5        | 0.31          |
| (1,10) | 1:A:2:MET:HA | 1:A:3:ARG:HG2   | 14       | 0.31          |
| (1,10) | 1:A:2:MET:HA | 1:A:3:ARG:HG3   | 14       | 0.31          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG12 | 2        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG13 | 2        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG12 | 5        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG13 | 5        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG12 | 6        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG13 | 6        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG12 | 7        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG13 | 7        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG12 | 9        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG13 | 9        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG12 | 12       | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG13 | 12       | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.3           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG12 | 15       | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG13 | 15       | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG12 | 20       | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG13 | 20       | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.3           |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.3           |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG12 | 8        | 0.3           |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG13 | 8        | 0.3           |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.3           |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.3           |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.3           |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2  | 13       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3  | 13       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2  | 13       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3  | 13       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2  | 13       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3  | 13       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2  | 13       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3  | 13       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2  | 13       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3  | 13       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2  | 13       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3  | 13       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2  | 16       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3  | 16       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2  | 16       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3  | 16       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2  | 16       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3  | 16       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2  | 16       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3  | 16       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2  | 16       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3  | 16       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2  | 16       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3  | 16       | 0.3           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2  | 17       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3  | 17       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2  | 17       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3  | 17       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2  | 17       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3  | 17       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2  | 17       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3  | 17       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2  | 17       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3  | 17       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2  | 17       | 0.3           |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3  | 17       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG12 | 3        | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG13 | 3        | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG12 | 3        | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG13 | 3        | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG12 | 13       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG13 | 13       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG12 | 13       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG13 | 13       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG12 | 14       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG13 | 14       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.3           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG12 | 14       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG13 | 14       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 15       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 15       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG12 | 15       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG13 | 15       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 18       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 18       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG12 | 18       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG13 | 18       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.3           |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.3           |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD11  | 2        | 0.3           |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD12  | 2        | 0.3           |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD13  | 2        | 0.3           |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD21  | 2        | 0.3           |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD22  | 2        | 0.3           |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD23  | 2        | 0.3           |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD11  | 13       | 0.3           |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD12  | 13       | 0.3           |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD13  | 13       | 0.3           |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD21  | 13       | 0.3           |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD22  | 13       | 0.3           |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HD23  | 13       | 0.3           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1       | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|--------------|----------------|----------|---------------|
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 14       | 0.3           |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 14       | 0.3           |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 14       | 0.3           |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 14       | 0.3           |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 14       | 0.3           |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 14       | 0.3           |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 2        | 0.3           |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 2        | 0.3           |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 2        | 0.3           |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 2        | 0.3           |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 2        | 0.3           |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 2        | 0.3           |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 13       | 0.3           |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 13       | 0.3           |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 13       | 0.3           |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 13       | 0.3           |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 13       | 0.3           |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 13       | 0.3           |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 14       | 0.3           |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 14       | 0.3           |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 14       | 0.3           |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 14       | 0.3           |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 14       | 0.3           |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 14       | 0.3           |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB2  | 4        | 0.3           |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB3  | 4        | 0.3           |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB2  | 8        | 0.3           |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB3  | 8        | 0.3           |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB2  | 10       | 0.3           |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB3  | 10       | 0.3           |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB2  | 13       | 0.3           |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB3  | 13       | 0.3           |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB2  | 17       | 0.3           |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB3  | 17       | 0.3           |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB2  | 18       | 0.3           |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB3  | 18       | 0.3           |
| (1,84) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HA   | 1        | 0.3           |
| (1,84) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HA   | 4        | 0.3           |
| (1,84) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HA   | 5        | 0.3           |
| (1,84) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HA   | 6        | 0.3           |
| (1,84) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HA   | 7        | 0.3           |
| (1,84) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HA   | 8        | 0.3           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,84)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HA   | 10       | 0.3           |
| (1,84)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HA   | 16       | 0.3           |
| (1,84)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HA   | 18       | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H   | 1        | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H   | 1        | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H   | 3        | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H   | 3        | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H   | 4        | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H   | 4        | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H   | 5        | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H   | 5        | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H   | 6        | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H   | 6        | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H   | 8        | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H   | 8        | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H   | 9        | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H   | 9        | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H   | 13       | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H   | 13       | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H   | 14       | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H   | 14       | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H   | 16       | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H   | 16       | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H   | 17       | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H   | 17       | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H   | 18       | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H   | 18       | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H   | 19       | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H   | 19       | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H   | 20       | 0.3           |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H   | 20       | 0.3           |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD2 | 7        | 0.3           |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD3 | 7        | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA  | 2        | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA  | 2        | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA  | 3        | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA  | 3        | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA  | 6        | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA  | 6        | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA  | 7        | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA  | 7        | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA  | 9        | 0.3           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA   | 9        | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA   | 10       | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA   | 10       | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA   | 11       | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA   | 11       | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA   | 12       | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA   | 12       | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA   | 13       | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA   | 13       | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA   | 14       | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA   | 14       | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA   | 16       | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA   | 16       | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA   | 17       | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA   | 17       | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA   | 18       | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA   | 18       | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA   | 20       | 0.3           |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA   | 20       | 0.3           |
| (1,629) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.3           |
| (1,629) | 1:A:13:LEU:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.3           |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB2  | 4        | 0.3           |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB3  | 4        | 0.3           |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB2  | 8        | 0.3           |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB3  | 8        | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 1        | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 1        | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 2        | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 2        | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 6        | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 6        | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 9        | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 9        | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 10       | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 10       | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 12       | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 12       | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 13       | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 13       | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 16       | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 16       | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 17       | 0.3           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 17       | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 18       | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 18       | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE21 | 20       | 0.3           |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HE22 | 20       | 0.3           |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA   | 4        | 0.3           |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA   | 4        | 0.3           |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA   | 8        | 0.3           |
| (1,539) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA   | 8        | 0.3           |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA   | 4        | 0.3           |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA   | 4        | 0.3           |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HA   | 8        | 0.3           |
| (1,535) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HA   | 8        | 0.3           |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 4        | 0.3           |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 8        | 0.3           |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB2  | 1        | 0.3           |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB3  | 1        | 0.3           |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB2  | 5        | 0.3           |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB3  | 5        | 0.3           |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB2  | 14       | 0.3           |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:14:GLN:HB3  | 14       | 0.3           |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA   | 4        | 0.3           |
| (1,501) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HA   | 8        | 0.3           |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.3           |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.3           |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.3           |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.3           |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.3           |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.3           |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.3           |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.3           |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.3           |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.3           |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.3           |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.3           |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.3           |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.3           |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.3           |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.3           |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.3           |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.3           |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE   | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.3           |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.3           |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.3           |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.3           |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.3           |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 1        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 1        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 1        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 1        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 2        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 2        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 2        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 2        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 3        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 3        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 3        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 3        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 6        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 6        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 6        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 6        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 7        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 7        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 7        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 7        | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 10       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 10       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 10       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 10       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 11       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 11       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 11       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 11       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 13       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 13       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 13       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 13       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 14       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 14       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 14       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 14       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 16       | 0.3           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 16       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 17       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 17       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 17       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 17       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 19       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 19       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 19       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 19       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.3           |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ   | 1        | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ   | 1        | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ   | 2        | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ   | 2        | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ   | 3        | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ   | 3        | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ   | 5        | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ   | 5        | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ   | 6        | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ   | 6        | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ   | 7        | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ   | 7        | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ   | 10       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ   | 10       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ   | 11       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ   | 11       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ   | 12       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ   | 12       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ   | 13       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ   | 13       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ   | 14       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ   | 14       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ   | 15       | 0.3           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ    | 15       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ    | 16       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ    | 16       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ    | 17       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ    | 17       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ    | 18       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ    | 18       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ    | 19       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ    | 19       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20       | 0.3           |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ    | 20       | 0.3           |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HA    | 4        | 0.3           |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HA    | 4        | 0.3           |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HA    | 4        | 0.3           |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HA    | 8        | 0.3           |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HA    | 8        | 0.3           |
| (1,263) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HA    | 8        | 0.3           |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2   | 11       | 0.3           |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3   | 11       | 0.3           |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2   | 11       | 0.3           |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3   | 11       | 0.3           |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB2   | 18       | 0.3           |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HB3   | 18       | 0.3           |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB2   | 18       | 0.3           |
| (1,25)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HB3   | 18       | 0.3           |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HA    | 1        | 0.3           |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HA    | 6        | 0.3           |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HA    | 7        | 0.3           |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HA    | 10       | 0.3           |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HA    | 11       | 0.3           |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HA    | 12       | 0.3           |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HA    | 15       | 0.3           |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HA    | 16       | 0.3           |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HA    | 18       | 0.3           |
| (1,205) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HA    | 20       | 0.3           |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:8:PHE:H     | 9        | 0.3           |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:8:PHE:H     | 19       | 0.3           |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG12 | 1        | 0.29          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG13 | 1        | 0.29          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.29          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.29          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.29          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG12 | 3        | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG13 | 3        | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG12 | 11       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG13 | 11       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG12 | 13       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG13 | 13       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG12 | 14       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG13 | 14       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG12 | 18       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG13 | 18       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.29          |
| (2,9)  | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.29          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG12 | 4        | 0.29          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG13 | 4        | 0.29          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.29          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.29          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.29          |
| (2,7)  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.29          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H    | 15       | 0.29          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H    | 15       | 0.29          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H    | 15       | 0.29          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H    | 15       | 0.29          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H    | 15       | 0.29          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H   | 15       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2 | 1        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3 | 1        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2 | 1        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3 | 1        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2 | 1        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3 | 1        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2 | 1        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3 | 1        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2 | 1        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3 | 1        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2 | 1        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3 | 1        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2 | 3        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3 | 3        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2 | 3        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3 | 3        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2 | 3        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3 | 3        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2 | 3        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3 | 3        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2 | 3        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3 | 3        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2 | 3        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3 | 3        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2 | 6        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3 | 6        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2 | 6        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3 | 6        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2 | 6        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3 | 6        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2 | 6        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3 | 6        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2 | 6        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3 | 6        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2 | 6        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3 | 6        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2 | 7        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3 | 7        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2 | 7        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3 | 7        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2 | 7        | 0.29          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3 | 7        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2 | 7        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3 | 7        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2 | 7        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3 | 7        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2 | 7        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3 | 7        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2 | 9        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3 | 9        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2 | 9        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3 | 9        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2 | 9        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3 | 9        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2 | 9        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3 | 9        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2 | 9        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3 | 9        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2 | 9        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3 | 9        | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2 | 10       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3 | 10       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2 | 10       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3 | 10       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2 | 10       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3 | 10       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2 | 10       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3 | 10       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2 | 10       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3 | 10       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2 | 10       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3 | 10       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2 | 14       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3 | 14       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2 | 14       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3 | 14       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2 | 14       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3 | 14       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2 | 14       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3 | 14       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2 | 14       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3 | 14       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2 | 14       | 0.29          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3  | 14       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2  | 18       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3  | 18       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2  | 18       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3  | 18       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2  | 18       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3  | 18       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2  | 18       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3  | 18       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2  | 18       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3  | 18       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2  | 18       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3  | 18       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2  | 20       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3  | 20       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2  | 20       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3  | 20       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2  | 20       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3  | 20       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2  | 20       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3  | 20       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2  | 20       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3  | 20       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2  | 20       | 0.29          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3  | 20       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG12 | 1        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG13 | 1        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG12 | 1        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG13 | 1        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG12 | 2        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG13 | 2        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.29          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG12 | 2        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG13 | 2        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 6        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 6        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG12 | 6        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG13 | 6        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 7        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 7        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG12 | 7        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG13 | 7        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 10       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 10       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG12 | 10       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG13 | 10       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.29          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 11       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 11       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG12 | 11       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG13 | 11       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 12       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 12       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG12 | 12       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG13 | 12       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 20       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 20       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG12 | 20       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG13 | 20       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.29          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.29          |
| (1,98) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HB2   | 3        | 0.29          |
| (1,98) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HB3   | 3        | 0.29          |
| (1,98) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HB2   | 4        | 0.29          |
| (1,98) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HB3   | 4        | 0.29          |
| (1,98) | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HB2   | 6        | 0.29          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1       | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|--------------|----------------|----------|---------------|
| (1,98) | 1:A:3:ARG:H  | 1:A:4:LEU:HB3  | 6        | 0.29          |
| (1,98) | 1:A:3:ARG:H  | 1:A:4:LEU:HB2  | 7        | 0.29          |
| (1,98) | 1:A:3:ARG:H  | 1:A:4:LEU:HB3  | 7        | 0.29          |
| (1,98) | 1:A:3:ARG:H  | 1:A:4:LEU:HB2  | 8        | 0.29          |
| (1,98) | 1:A:3:ARG:H  | 1:A:4:LEU:HB3  | 8        | 0.29          |
| (1,98) | 1:A:3:ARG:H  | 1:A:4:LEU:HB2  | 10       | 0.29          |
| (1,98) | 1:A:3:ARG:H  | 1:A:4:LEU:HB3  | 10       | 0.29          |
| (1,98) | 1:A:3:ARG:H  | 1:A:4:LEU:HB2  | 16       | 0.29          |
| (1,98) | 1:A:3:ARG:H  | 1:A:4:LEU:HB3  | 16       | 0.29          |
| (1,98) | 1:A:3:ARG:H  | 1:A:4:LEU:HB2  | 18       | 0.29          |
| (1,98) | 1:A:3:ARG:H  | 1:A:4:LEU:HB3  | 18       | 0.29          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 19       | 0.29          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 19       | 0.29          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 19       | 0.29          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 19       | 0.29          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 19       | 0.29          |
| (1,87) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 19       | 0.29          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 19       | 0.29          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 19       | 0.29          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 19       | 0.29          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 19       | 0.29          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 19       | 0.29          |
| (1,86) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 19       | 0.29          |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB2  | 1        | 0.29          |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB3  | 1        | 0.29          |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB2  | 2        | 0.29          |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB3  | 2        | 0.29          |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB2  | 3        | 0.29          |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB3  | 3        | 0.29          |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB2  | 5        | 0.29          |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB3  | 5        | 0.29          |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB2  | 6        | 0.29          |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB3  | 6        | 0.29          |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB2  | 7        | 0.29          |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB3  | 7        | 0.29          |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB2  | 11       | 0.29          |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB3  | 11       | 0.29          |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB2  | 12       | 0.29          |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB3  | 12       | 0.29          |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB2  | 14       | 0.29          |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB3  | 14       | 0.29          |
| (1,85) | 1:A:3:ARG:HA | 1:A:4:LEU:HB2  | 15       | 0.29          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,85)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HB3 | 15       | 0.29          |
| (1,85)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HB2 | 16       | 0.29          |
| (1,85)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HB3 | 16       | 0.29          |
| (1,85)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HB2 | 19       | 0.29          |
| (1,85)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HB3 | 19       | 0.29          |
| (1,85)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HB2 | 20       | 0.29          |
| (1,85)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HB3 | 20       | 0.29          |
| (1,84)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HA  | 3        | 0.29          |
| (1,84)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HA  | 11       | 0.29          |
| (1,84)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HA  | 15       | 0.29          |
| (1,84)  | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:4:LEU:HA  | 20       | 0.29          |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H  | 7        | 0.29          |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H  | 7        | 0.29          |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H  | 11       | 0.29          |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H  | 11       | 0.29          |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H  | 12       | 0.29          |
| (1,738) | 1:A:16:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:H  | 12       | 0.29          |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HA | 4        | 0.29          |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HA | 8        | 0.29          |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA | 1        | 0.29          |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA | 1        | 0.29          |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA | 5        | 0.29          |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA | 5        | 0.29          |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:HA | 19       | 0.29          |
| (1,714) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:HA | 19       | 0.29          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H  | 15       | 0.29          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H  | 15       | 0.29          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H  | 15       | 0.29          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H  | 15       | 0.29          |
| (1,629) | 1:A:13:LEU:HB2 | 1:A:14:GLN:H  | 8        | 0.29          |
| (1,629) | 1:A:13:LEU:HB3 | 1:A:14:GLN:H  | 8        | 0.29          |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:14:GLN:H  | 1        | 0.29          |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:14:GLN:H  | 2        | 0.29          |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:14:GLN:H  | 3        | 0.29          |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:14:GLN:H  | 5        | 0.29          |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:14:GLN:H  | 6        | 0.29          |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:14:GLN:H  | 7        | 0.29          |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:14:GLN:H  | 9        | 0.29          |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:14:GLN:H  | 10       | 0.29          |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:14:GLN:H  | 12       | 0.29          |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:14:GLN:H  | 13       | 0.29          |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:14:GLN:H  | 14       | 0.29          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:14:GLN:H   | 16       | 0.29          |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:14:GLN:H   | 17       | 0.29          |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:14:GLN:H   | 18       | 0.29          |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:14:GLN:H   | 19       | 0.29          |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA | 1:A:14:GLN:H   | 20       | 0.29          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 5        | 0.29          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 5        | 0.29          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 15       | 0.29          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 15       | 0.29          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HA  | 2        | 0.29          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HA  | 3        | 0.29          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HA  | 5        | 0.29          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HA  | 6        | 0.29          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HA  | 7        | 0.29          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HA  | 9        | 0.29          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HA  | 10       | 0.29          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HA  | 11       | 0.29          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HA  | 12       | 0.29          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HA  | 14       | 0.29          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HA  | 17       | 0.29          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HA  | 18       | 0.29          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HA  | 19       | 0.29          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HA  | 20       | 0.29          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 5        | 0.29          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 5        | 0.29          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 5        | 0.29          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 5        | 0.29          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 9        | 0.29          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 9        | 0.29          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 9        | 0.29          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 9        | 0.29          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 15       | 0.29          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 15       | 0.29          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 15       | 0.29          |
| (1,404) | 1:A:8:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 15       | 0.29          |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ   | 4        | 0.29          |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ   | 4        | 0.29          |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ   | 8        | 0.29          |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ   | 8        | 0.29          |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HZ   | 9        | 0.29          |
| (1,277) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HZ   | 9        | 0.29          |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HZ   | 4        | 0.29          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG    | 1:A:7:PHE:HZ  | 8        | 0.29          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H     | 1:A:5:SER:HA  | 5        | 0.29          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H     | 1:A:5:SER:HA  | 14       | 0.29          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H     | 1:A:5:SER:HA  | 17       | 0.29          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:3:ARG:HG2 | 3        | 0.29          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:3:ARG:HG3 | 3        | 0.29          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:3:ARG:HG2 | 11       | 0.29          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:3:ARG:HG3 | 11       | 0.29          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:3:ARG:HG2 | 3        | 0.29          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:3:ARG:HG3 | 3        | 0.29          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:3:ARG:HG2 | 11       | 0.29          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:3:ARG:HG3 | 11       | 0.29          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H  | 1        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H  | 1        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H  | 1        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H  | 1        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H  | 1        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H  | 1        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H  | 2        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H  | 2        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H  | 2        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H  | 2        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H  | 2        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H  | 2        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H  | 3        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H  | 3        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H  | 3        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H  | 3        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H  | 3        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H  | 3        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H  | 4        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H  | 4        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H  | 4        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H  | 4        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H  | 4        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H  | 4        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H  | 5        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H  | 5        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H  | 5        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H  | 5        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H  | 5        | 0.28          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H  | 5        | 0.28          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|--------------|----------|---------------|
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 6        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 6        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 6        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H | 6        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H | 6        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H | 6        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 7        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 7        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 7        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H | 7        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H | 7        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H | 7        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 8        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 8        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 8        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H | 8        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H | 8        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H | 8        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 9        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 9        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 9        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H | 9        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H | 9        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H | 9        | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 10       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 10       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 10       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H | 10       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H | 10       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H | 10       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 12       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 12       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 12       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H | 12       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H | 12       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H | 12       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H | 13       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H | 13       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H | 13       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H | 13       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H | 13       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H | 13       | 0.28          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H   | 14       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H   | 14       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 14       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H   | 14       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H   | 14       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H   | 14       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H   | 16       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H   | 16       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 16       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H   | 16       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H   | 16       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H   | 16       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H   | 19       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.28          |
| (2,43) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.28          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2 | 2        | 0.28          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3 | 2        | 0.28          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2 | 2        | 0.28          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3 | 2        | 0.28          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2 | 2        | 0.28          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3 | 2        | 0.28          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2 | 2        | 0.28          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3 | 2        | 0.28          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2 | 2        | 0.28          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3 | 2        | 0.28          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2 | 2        | 0.28          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3 | 2        | 0.28          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2 | 5        | 0.28          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3 | 5        | 0.28          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2 | 5        | 0.28          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3 | 5        | 0.28          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2 | 5        | 0.28          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3 | 5        | 0.28          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2 | 5        | 0.28          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3 | 5        | 0.28          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2 | 5        | 0.28          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3 | 5        | 0.28          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2 | 5        | 0.28          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3 | 5        | 0.28          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HB2  | 1        | 0.28          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HB3  | 1        | 0.28          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HB2  | 15       | 0.28          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HB3  | 15       | 0.28          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HB2  | 20       | 0.28          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H     | 1:A:4:LEU:HB3  | 20       | 0.28          |
| (1,84)  | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:4:LEU:HA   | 9        | 0.28          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HD2 | 4        | 0.28          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HD3 | 4        | 0.28          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HD2 | 8        | 0.28          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HD3 | 8        | 0.28          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2  | 1:A:16:LYS:H   | 4        | 0.28          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3  | 1:A:16:LYS:H   | 4        | 0.28          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2  | 1:A:16:LYS:H   | 8        | 0.28          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3  | 1:A:16:LYS:H   | 8        | 0.28          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2  | 1:A:16:LYS:H   | 4        | 0.28          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3  | 1:A:16:LYS:H   | 4        | 0.28          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2  | 1:A:16:LYS:H   | 8        | 0.28          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3  | 1:A:16:LYS:H   | 8        | 0.28          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:16:LYS:H   | 4        | 0.28          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:16:LYS:H   | 8        | 0.28          |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HA  | 2        | 0.28          |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HA  | 5        | 0.28          |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:HA  | 14       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE1 | 1        | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE2 | 1        | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE1 | 2        | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE2 | 2        | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE1 | 3        | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE2 | 3        | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE1 | 4        | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE2 | 4        | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE1 | 6        | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE2 | 6        | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE1 | 7        | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:11:PHE:HE2 | 7        | 0.28          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 8        | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 8        | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 9        | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 9        | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 10       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 10       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 11       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 11       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 12       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 12       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 13       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 13       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 14       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 14       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 16       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 17       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 17       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 19       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 19       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.28          |
| (1,525) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.28          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HA  | 1        | 0.28          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HA  | 13       | 0.28          |
| (1,489) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HA  | 16       | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 1        | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 1        | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 2        | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 2        | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 3        | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 3        | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 5        | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 5        | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 6        | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 6        | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 7        | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 7        | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 9        | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 9        | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 10       | 0.28          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 10       | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 11       | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 11       | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 12       | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 12       | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 13       | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 13       | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 14       | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 14       | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 16       | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 16       | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 17       | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 17       | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 18       | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 18       | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 19       | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 19       | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 20       | 0.28          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 20       | 0.28          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA  | 4        | 0.28          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA  | 4        | 0.28          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA  | 8        | 0.28          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA  | 8        | 0.28          |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HZ   | 10       | 0.28          |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HZ   | 18       | 0.28          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:5:SER:HA   | 1        | 0.28          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:5:SER:HA   | 2        | 0.28          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:5:SER:HA   | 3        | 0.28          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:5:SER:HA   | 4        | 0.28          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:5:SER:HA   | 6        | 0.28          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:5:SER:HA   | 7        | 0.28          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:5:SER:HA   | 8        | 0.28          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:5:SER:HA   | 10       | 0.28          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:5:SER:HA   | 11       | 0.28          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:5:SER:HA   | 12       | 0.28          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:5:SER:HA   | 13       | 0.28          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:5:SER:HA   | 15       | 0.28          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:5:SER:HA   | 16       | 0.28          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:5:SER:HA   | 18       | 0.28          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:5:SER:HA   | 19       | 0.28          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:5:SER:HA   | 20       | 0.28          |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 1        | 0.28          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:8:PHE:H     | 2        | 0.28          |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:8:PHE:H     | 13       | 0.28          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:H     | 5        | 0.28          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:H     | 5        | 0.28          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:3:ARG:HG2   | 15       | 0.28          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:3:ARG:HG3   | 15       | 0.28          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:3:ARG:HG2   | 20       | 0.28          |
| (1,11)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:3:ARG:HG3   | 20       | 0.28          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:H     | 5        | 0.28          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:H     | 5        | 0.28          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:3:ARG:HG2   | 15       | 0.28          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:3:ARG:HG3   | 15       | 0.28          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:3:ARG:HG2   | 20       | 0.28          |
| (1,10)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:3:ARG:HG3   | 20       | 0.28          |
| (3,9)   | 1:A:10:ASP:O    | 1:A:14:GLN:H    | 15       | 0.27          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG12 | 8        | 0.27          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG13 | 8        | 0.27          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.27          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.27          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.27          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ    | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.27          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H    | 17       | 0.27          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H    | 17       | 0.27          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H    | 17       | 0.27          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H    | 17       | 0.27          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H    | 17       | 0.27          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H    | 17       | 0.27          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H    | 18       | 0.27          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H    | 18       | 0.27          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H    | 18       | 0.27          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H    | 18       | 0.27          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H    | 18       | 0.27          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H    | 18       | 0.27          |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:12:ILE:HG12 | 5        | 0.27          |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:12:ILE:HG13 | 5        | 0.27          |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.27          |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.27          |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.27          |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD1   | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.27          |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD2   | 1:A:12:ILE:HG12 | 5        | 0.27          |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD2   | 1:A:12:ILE:HG13 | 5        | 0.27          |
| (2,3)   | 1:A:7:PHE:HD2   | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.27          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key   | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|-------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 9        | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 9        | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 9        | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 9        | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 16       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 16       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 16       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 16       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 17       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 17       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 17       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 17       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 19       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 19       | 0.27          |
| (2,3) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.27          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.27          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.27          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.27          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 19       | 0.27          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 19       | 0.27          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.27          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.27          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.27          |
| (2,3)  | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 5        | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 5        | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 9        | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 9        | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 16       | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 16       | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 17       | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 17       | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 19       | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 19       | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.27          |
| (2,27) | 1:A:11:PHE:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.27          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 1        | 0.27          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 1        | 0.27          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.27          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.27          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.27          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.27          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:12:ILE:HG12 | 12       | 0.27          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:12:ILE:HG13 | 12       | 0.27          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.27          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.27          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.27          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.27          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:12:ILE:HG12 | 15       | 0.27          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:12:ILE:HG13 | 15       | 0.27          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.27          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.27          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.27          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 3        | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 3        | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 11       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 11       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 13       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 13       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 14       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 14       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 18       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 18       | 0.27          |
| (2,16) | 1:A:9:ARG:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.27          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.27          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.27          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.27          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HB2   | 11       | 0.27          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HB3   | 11       | 0.27          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HB2   | 12       | 0.27          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HB3   | 12       | 0.27          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HB2   | 17       | 0.27          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HB3   | 17       | 0.27          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD2  | 9        | 0.27          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD3  | 9        | 0.27          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD2  | 15       | 0.27          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD3  | 15       | 0.27          |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HA   | 13       | 0.27          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.27          |
| (1,711) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.27          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.27          |
| (1,710) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.27          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 1        | 0.27          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 12       | 0.27          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 14       | 0.27          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 19       | 0.27          |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:14:GLN:H    | 11       | 0.27          |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:14:GLN:H    | 15       | 0.27          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB2  | 12       | 0.27          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB3  | 12       | 0.27          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB2  | 16       | 0.27          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB3  | 16       | 0.27          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB   | 4        | 0.27          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB   | 4        | 0.27          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HB   | 8        | 0.27          |
| (1,536) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HB   | 8        | 0.27          |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 1        | 0.27          |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 3        | 0.27          |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 6        | 0.27          |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 7        | 0.27          |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 9        | 0.27          |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 10       | 0.27          |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 11       | 0.27          |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 12       | 0.27          |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 13       | 0.27          |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 15       | 0.27          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 16       | 0.27          |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 17       | 0.27          |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 18       | 0.27          |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 19       | 0.27          |
| (1,532) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:HA | 20       | 0.27          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H  | 4        | 0.27          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H  | 4        | 0.27          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H  | 8        | 0.27          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H  | 8        | 0.27          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H  | 12       | 0.27          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H  | 12       | 0.27          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H  | 1        | 0.27          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H  | 2        | 0.27          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H  | 3        | 0.27          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H  | 4        | 0.27          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H  | 5        | 0.27          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H  | 6        | 0.27          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H  | 7        | 0.27          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H  | 8        | 0.27          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H  | 9        | 0.27          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H  | 10       | 0.27          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H  | 11       | 0.27          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H  | 12       | 0.27          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H  | 13       | 0.27          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H  | 14       | 0.27          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H  | 16       | 0.27          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H  | 17       | 0.27          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H  | 18       | 0.27          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H  | 19       | 0.27          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H  | 20       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA | 2        | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA | 2        | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA | 3        | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA | 3        | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA | 5        | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA | 5        | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA | 6        | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA | 6        | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA | 7        | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA | 7        | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HA | 9        | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HA | 9        | 0.27          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HA | 10       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HA | 10       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HA | 11       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HA | 11       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HA | 12       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HA | 12       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HA | 13       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HA | 13       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HA | 14       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HA | 14       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HA | 16       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HA | 16       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HA | 17       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HA | 17       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HA | 18       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HA | 18       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HA | 19       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HA | 19       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HA | 20       | 0.27          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HA | 20       | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 1        | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 2        | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 3        | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 4        | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 5        | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 6        | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 7        | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 8        | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 9        | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 10       | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 11       | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 12       | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 13       | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 14       | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 15       | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 16       | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 17       | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 18       | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 19       | 0.27          |
| (1,303) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HZ  | 20       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 1        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 1        | 0.27          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 1        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 1        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 2        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 2        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 2        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 2        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 3        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 3        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 3        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 3        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 5        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 5        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 5        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 5        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 6        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 6        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 6        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 6        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 7        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 7        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 7        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 7        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 9        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 9        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 9        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 9        | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 10       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 10       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 10       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 10       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 11       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 11       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 11       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 11       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 12       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 12       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 12       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 12       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 13       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 13       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 13       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 13       | 0.27          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 14       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 14       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 14       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 14       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 15       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 15       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 15       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 15       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 16       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 16       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 16       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 16       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 17       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 17       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 17       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 17       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 18       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 18       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 18       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 18       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 19       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 19       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 19       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 19       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1 | 20       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2 | 20       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1 | 20       | 0.27          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2 | 20       | 0.27          |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HZ  | 3        | 0.27          |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HZ  | 6        | 0.27          |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HZ  | 7        | 0.27          |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HZ  | 15       | 0.27          |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HZ  | 16       | 0.27          |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HZ  | 20       | 0.27          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB1 | 4        | 0.27          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB2 | 4        | 0.27          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB3 | 4        | 0.27          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB1 | 8        | 0.27          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB2 | 8        | 0.27          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB3 | 8        | 0.27          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB1 | 9        | 0.27          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB2 | 9        | 0.27          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H     | 1:A:6:ALA:HB3  | 9        | 0.27          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H     | 1:A:6:ALA:HB1  | 18       | 0.27          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H     | 1:A:6:ALA:HB2  | 18       | 0.27          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H     | 1:A:6:ALA:HB3  | 18       | 0.27          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11  | 1:A:6:ALA:H    | 9        | 0.27          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12  | 1:A:6:ALA:H    | 9        | 0.27          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13  | 1:A:6:ALA:H    | 9        | 0.27          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21  | 1:A:6:ALA:H    | 9        | 0.27          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22  | 1:A:6:ALA:H    | 9        | 0.27          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:6:ALA:H    | 9        | 0.27          |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:8:PHE:H    | 12       | 0.27          |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:8:PHE:H    | 14       | 0.27          |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:8:PHE:H    | 16       | 0.27          |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:8:PHE:H    | 17       | 0.27          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:H    | 3        | 0.27          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:H    | 3        | 0.27          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:H    | 11       | 0.27          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:H    | 11       | 0.27          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:H    | 14       | 0.27          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:H    | 14       | 0.27          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:H    | 15       | 0.27          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:H    | 15       | 0.27          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:H    | 20       | 0.27          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:H    | 20       | 0.27          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:H    | 3        | 0.27          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:H    | 3        | 0.27          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:H    | 11       | 0.27          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:H    | 11       | 0.27          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:H    | 14       | 0.27          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:H    | 14       | 0.27          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:H    | 15       | 0.27          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:H    | 15       | 0.27          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2   | 1:A:5:SER:H    | 20       | 0.27          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3   | 1:A:5:SER:H    | 20       | 0.27          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2 | 4        | 0.26          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3 | 4        | 0.26          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2 | 4        | 0.26          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3 | 4        | 0.26          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2 | 4        | 0.26          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3 | 4        | 0.26          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2 | 4        | 0.26          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3 | 4        | 0.26          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2  | 4        | 0.26          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3  | 4        | 0.26          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2  | 4        | 0.26          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3  | 4        | 0.26          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2  | 8        | 0.26          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3  | 8        | 0.26          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2  | 8        | 0.26          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3  | 8        | 0.26          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2  | 8        | 0.26          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3  | 8        | 0.26          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2  | 8        | 0.26          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3  | 8        | 0.26          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2  | 8        | 0.26          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3  | 8        | 0.26          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2  | 8        | 0.26          |
| (2,41) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3  | 8        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG12 | 4        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG13 | 4        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG12 | 4        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG13 | 4        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG12 | 5        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG13 | 5        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG12 | 5        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG13 | 5        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG12 | 9        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG13 | 9        | 0.26          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG12 | 9        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG13 | 9        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 16       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 16       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG12 | 16       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG13 | 16       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 19       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 19       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG12 | 19       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG13 | 19       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.26          |
| (2,22) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.26          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HG12 | 2        | 0.26          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HG13 | 2        | 0.26          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.26          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.26          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.26          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.26          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HG12 | 6        | 0.26          |
| (2,19) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HG13 | 6        | 0.26          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 7        | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 7        | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 10       | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 10       | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG12 | 20       | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG13 | 20       | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.26          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.26          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:4:LEU:HB2   | 2        | 0.26          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:4:LEU:HB3   | 2        | 0.26          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:4:LEU:HB2   | 13       | 0.26          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H   | 1:A:4:LEU:HB3   | 13       | 0.26          |
| (1,85)  | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HB2   | 9        | 0.26          |
| (1,85)  | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:4:LEU:HB3   | 9        | 0.26          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2  | 3        | 0.26          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3  | 3        | 0.26          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2  | 10       | 0.26          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3  | 10       | 0.26          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2  | 13       | 0.26          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3  | 13       | 0.26          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2  | 14       | 0.26          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3  | 14       | 0.26          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2  | 17       | 0.26          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3  | 17       | 0.26          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2  | 18       | 0.26          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3  | 18       | 0.26          |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H  | 1:A:16:LYS:HA   | 2        | 0.26          |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H  | 1:A:16:LYS:HA   | 3        | 0.26          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HA | 6        | 0.26          |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HA | 7        | 0.26          |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HA | 9        | 0.26          |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HA | 10       | 0.26          |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HA | 14       | 0.26          |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HA | 16       | 0.26          |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HA | 17       | 0.26          |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HA | 18       | 0.26          |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HA | 19       | 0.26          |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HA | 20       | 0.26          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:16:LYS:H  | 4        | 0.26          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:16:LYS:H  | 4        | 0.26          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:16:LYS:H  | 8        | 0.26          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:16:LYS:H  | 8        | 0.26          |
| (1,668) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:14:GLN:H  | 15       | 0.26          |
| (1,668) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:14:GLN:H  | 15       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H  | 1        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H  | 1        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H  | 1        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H  | 1        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H  | 1        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H  | 1        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H  | 2        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H  | 2        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H  | 2        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H  | 2        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H  | 2        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H  | 2        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H  | 3        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H  | 3        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H  | 3        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H  | 3        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H  | 3        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H  | 3        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H  | 5        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H  | 5        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H  | 5        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H  | 5        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H  | 5        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H  | 5        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H  | 6        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H  | 6        | 0.26          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|--------------|----------|---------------|
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 6        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 6        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 6        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 6        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 7        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 7        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 7        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 7        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 7        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 7        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 11       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 11       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 11       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 11       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 11       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 11       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 14       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 14       | 0.26          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|--------------|----------|---------------|
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 14       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 14       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 14       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 14       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 16       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 16       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 16       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 16       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 16       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 16       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 17       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 17       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 17       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 17       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 17       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 17       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 18       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 18       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 18       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 18       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 18       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 18       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 19       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 19       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 19       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 19       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 19       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 19       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 20       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 20       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 20       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 20       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 20       | 0.26          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 20       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 1        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 1        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 1        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 1        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 1        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 1        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 2        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 2        | 0.26          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|--------------|----------|---------------|
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 2        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 2        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 2        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 2        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 3        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 3        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 3        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 3        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 3        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 3        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 5        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 5        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 5        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 5        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 5        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 5        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 6        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 6        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 6        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 6        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 6        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 6        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 7        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 7        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 7        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 7        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 7        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 7        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 9        | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 10       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 11       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 11       | 0.26          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|--------------|----------|---------------|
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 11       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 11       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 11       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 11       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 12       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 13       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 14       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 14       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 14       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 14       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 14       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 14       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 16       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 16       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 16       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 16       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 16       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 16       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 17       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 17       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 17       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 17       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 17       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 17       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 18       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 18       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H | 18       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H | 18       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H | 18       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H | 18       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H | 19       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H | 19       | 0.26          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H    | 19       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H    | 19       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H    | 19       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H    | 19       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.26          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.26          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 1        | 0.26          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 2        | 0.26          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 3        | 0.26          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 5        | 0.26          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 6        | 0.26          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 7        | 0.26          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 9        | 0.26          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 10       | 0.26          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 13       | 0.26          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 14       | 0.26          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 15       | 0.26          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 16       | 0.26          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 17       | 0.26          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 18       | 0.26          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 19       | 0.26          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.26          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:16:LYS:H    | 2        | 0.26          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:16:LYS:H    | 3        | 0.26          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:16:LYS:H    | 5        | 0.26          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:16:LYS:H    | 6        | 0.26          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:16:LYS:H    | 7        | 0.26          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:16:LYS:H    | 9        | 0.26          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:16:LYS:H    | 10       | 0.26          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:16:LYS:H    | 13       | 0.26          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:16:LYS:H    | 16       | 0.26          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:16:LYS:H    | 17       | 0.26          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:16:LYS:H    | 18       | 0.26          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:16:LYS:H    | 20       | 0.26          |
| (1,596) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:14:GLN:HE21 | 15       | 0.26          |
| (1,596) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:14:GLN:HE22 | 15       | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HB2  | 1        | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HB3  | 1        | 0.26          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 2        | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 2        | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 3        | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 3        | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 5        | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 5        | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 6        | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 6        | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 7        | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 7        | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 9        | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 9        | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 10       | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 10       | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 11       | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 11       | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 13       | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 13       | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 14       | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 14       | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 17       | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 17       | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 18       | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 18       | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 19       | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 19       | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB2 | 20       | 0.26          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:13:LEU:HB3 | 20       | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H   | 1        | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H   | 1        | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H   | 2        | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H   | 2        | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H   | 3        | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H   | 3        | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H   | 5        | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H   | 5        | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H   | 6        | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H   | 6        | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H   | 7        | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H   | 7        | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H   | 9        | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H   | 9        | 0.26          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 10       | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 10       | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 11       | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 11       | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 13       | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 13       | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 14       | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 14       | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 16       | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 16       | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 17       | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 17       | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 18       | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 18       | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 19       | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 19       | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:12:ILE:H    | 20       | 0.26          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:12:ILE:H    | 20       | 0.26          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:11:PHE:HB2  | 4        | 0.26          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:11:PHE:HB3  | 4        | 0.26          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:11:PHE:HB2  | 8        | 0.26          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:11:PHE:HB3  | 8        | 0.26          |
| (1,480) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:11:PHE:H    | 15       | 0.26          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:13:LEU:H    | 4        | 0.26          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:13:LEU:H    | 4        | 0.26          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:13:LEU:H    | 8        | 0.26          |
| (1,464) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:13:LEU:H    | 8        | 0.26          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:12:ILE:HD11 | 4        | 0.26          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:12:ILE:HD12 | 4        | 0.26          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:12:ILE:HD13 | 4        | 0.26          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:12:ILE:HD11 | 8        | 0.26          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:12:ILE:HD12 | 8        | 0.26          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:12:ILE:HD13 | 8        | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:10:ASP:H    | 2        | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:10:ASP:H    | 2        | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:10:ASP:H    | 3        | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:10:ASP:H    | 3        | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:10:ASP:H    | 5        | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:10:ASP:H    | 5        | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:10:ASP:H    | 7        | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:10:ASP:H    | 7        | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:10:ASP:H    | 10       | 0.26          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:10:ASP:H  | 10       | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 11       | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:10:ASP:H  | 11       | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 13       | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:10:ASP:H  | 13       | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 15       | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:10:ASP:H  | 15       | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 16       | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:10:ASP:H  | 16       | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 17       | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:10:ASP:H  | 17       | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 18       | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:10:ASP:H  | 18       | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 19       | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:10:ASP:H  | 19       | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2 | 1:A:10:ASP:H  | 20       | 0.26          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:10:ASP:H  | 20       | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA | 1        | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA | 1        | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA | 2        | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA | 2        | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA | 3        | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA | 3        | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA | 6        | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA | 6        | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA | 7        | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA | 7        | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA | 9        | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA | 9        | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA | 10       | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA | 10       | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA | 11       | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA | 11       | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA | 13       | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA | 13       | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA | 14       | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA | 14       | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA | 15       | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA | 15       | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA | 16       | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA | 16       | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA | 17       | 0.26          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA   | 17       | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA   | 18       | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA   | 18       | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA   | 19       | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA   | 19       | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA   | 20       | 0.26          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA   | 20       | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.26          |
| (1,358) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.26          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.26          |
| (1,357) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.26          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HA   | 1        | 0.26          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HA   | 1        | 0.26          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HA   | 15       | 0.26          |
| (1,345) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HA   | 15       | 0.26          |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H     | 9        | 0.26          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1   | 4        | 0.26          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2   | 4        | 0.26          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1   | 4        | 0.26          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2   | 4        | 0.26          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE1   | 8        | 0.26          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:7:PHE:HE2   | 8        | 0.26          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE1   | 8        | 0.26          |
| (1,275) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:7:PHE:HE2   | 8        | 0.26          |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HZ    | 1        | 0.26          |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HZ    | 11       | 0.26          |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HZ    | 12       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB1   | 1        | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB2   | 1        | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB3   | 1        | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB1   | 3        | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB2   | 3        | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB3   | 3        | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB1   | 6        | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB2   | 6        | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB3   | 6        | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB1   | 7        | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB2   | 7        | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB3   | 7        | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:6:ALA:HB1   | 10       | 0.26          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB2  | 10       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB3  | 10       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB1  | 11       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB2  | 11       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB3  | 11       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB1  | 12       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB2  | 12       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB3  | 12       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB1  | 15       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB2  | 15       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB3  | 15       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB1  | 16       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB2  | 16       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB3  | 16       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB1  | 17       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB2  | 17       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB3  | 17       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB1  | 20       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB2  | 20       | 0.26          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB3  | 20       | 0.26          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H    | 8        | 0.26          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H    | 8        | 0.26          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H    | 8        | 0.26          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H    | 8        | 0.26          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H    | 8        | 0.26          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H    | 8        | 0.26          |
| (1,158) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:5:SER:HA   | 9        | 0.26          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD11 | 14       | 0.26          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD12 | 14       | 0.26          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD13 | 14       | 0.26          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD21 | 14       | 0.26          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD22 | 14       | 0.26          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD23 | 14       | 0.26          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD11 | 19       | 0.26          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD12 | 19       | 0.26          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD13 | 19       | 0.26          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD21 | 19       | 0.26          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD22 | 19       | 0.26          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD23 | 19       | 0.26          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD11 | 14       | 0.26          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD12 | 14       | 0.26          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD13 | 14       | 0.26          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:4:LEU:HD21 | 14       | 0.26          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:4:LEU:HD22 | 14       | 0.26          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:4:LEU:HD23 | 14       | 0.26          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:4:LEU:HD11 | 19       | 0.26          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:4:LEU:HD12 | 19       | 0.26          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:4:LEU:HD13 | 19       | 0.26          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:4:LEU:HD21 | 19       | 0.26          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:4:LEU:HD22 | 19       | 0.26          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA  | 1:A:4:LEU:HD23 | 19       | 0.26          |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 6        | 0.26          |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 7        | 0.26          |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 8        | 0.26          |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 10       | 0.26          |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 18       | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:H    | 2        | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:H    | 2        | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:H    | 4        | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:H    | 4        | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:H    | 6        | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:H    | 6        | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:H    | 7        | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:H    | 7        | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:H    | 8        | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:H    | 8        | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:H    | 9        | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:H    | 9        | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:H    | 10       | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:H    | 10       | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:H    | 12       | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:H    | 12       | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:H    | 13       | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:H    | 13       | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:H    | 16       | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:H    | 16       | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:H    | 17       | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:H    | 17       | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:H    | 18       | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:H    | 18       | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:H    | 19       | 0.26          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:H    | 19       | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2 | 1:A:5:SER:H    | 2        | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3 | 1:A:5:SER:H    | 2        | 0.26          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:H     | 4        | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:H     | 4        | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:H     | 6        | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:H     | 6        | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:H     | 7        | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:H     | 7        | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:H     | 8        | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:H     | 8        | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:H     | 9        | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:H     | 9        | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:H     | 10       | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:H     | 10       | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:H     | 12       | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:H     | 12       | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:H     | 13       | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:H     | 13       | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:H     | 16       | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:H     | 16       | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:H     | 17       | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:H     | 17       | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:H     | 18       | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:H     | 18       | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:H     | 19       | 0.26          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:H     | 19       | 0.26          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG12 | 4        | 0.25          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG13 | 4        | 0.25          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.25          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.25          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.25          |
| (2,9)   | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.25          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 17       | 0.25          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 17       | 0.25          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.25          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.25          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.25          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.25          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG12 | 17       | 0.25          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG13 | 17       | 0.25          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.25          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.25          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.25          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HB2  | 5        | 0.25          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HB3  | 5        | 0.25          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HB2  | 14       | 0.25          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HB3  | 14       | 0.25          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HB2  | 19       | 0.25          |
| (1,98)  | 1:A:3:ARG:H    | 1:A:4:LEU:HB3  | 19       | 0.25          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD2 | 1        | 0.25          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD3 | 1        | 0.25          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD2 | 2        | 0.25          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD3 | 2        | 0.25          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD2 | 5        | 0.25          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD3 | 5        | 0.25          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD2 | 16       | 0.25          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD3 | 16       | 0.25          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD2 | 19       | 0.25          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD3 | 19       | 0.25          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD2 | 20       | 0.25          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD3 | 20       | 0.25          |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HA  | 1        | 0.25          |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HA  | 5        | 0.25          |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HA  | 12       | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H   | 1        | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H   | 1        | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H   | 2        | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H   | 2        | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H   | 3        | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H   | 3        | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H   | 6        | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H   | 6        | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H   | 7        | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H   | 7        | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H   | 9        | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H   | 9        | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H   | 10       | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H   | 10       | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H   | 11       | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H   | 11       | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H   | 12       | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H   | 12       | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H   | 13       | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H   | 13       | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H   | 14       | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3  | 1:A:15:ARG:H    | 14       | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2  | 1:A:15:ARG:H    | 16       | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3  | 1:A:15:ARG:H    | 16       | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2  | 1:A:15:ARG:H    | 17       | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3  | 1:A:15:ARG:H    | 17       | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2  | 1:A:15:ARG:H    | 18       | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3  | 1:A:15:ARG:H    | 18       | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2  | 1:A:15:ARG:H    | 19       | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3  | 1:A:15:ARG:H    | 19       | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2  | 1:A:15:ARG:H    | 20       | 0.25          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3  | 1:A:15:ARG:H    | 20       | 0.25          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:14:GLN:HE21 | 11       | 0.25          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:14:GLN:HE22 | 11       | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HE21 | 4        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HE22 | 4        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HE21 | 4        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HE22 | 4        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HE21 | 4        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HE22 | 4        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HE21 | 4        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HE22 | 4        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HE21 | 4        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HE22 | 4        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HE21 | 4        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HE22 | 4        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HE21 | 8        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HE22 | 8        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HE21 | 8        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HE22 | 8        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HE21 | 8        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HE22 | 8        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HE21 | 8        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HE22 | 8        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HE21 | 8        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HE22 | 8        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HE21 | 8        | 0.25          |
| (1,635) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HE22 | 8        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HE21 | 4        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HE22 | 4        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HE21 | 4        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HE22 | 4        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HE21 | 4        | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HE22 | 4        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HE21 | 4        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HE22 | 4        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HE21 | 4        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HE22 | 4        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HE21 | 4        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HE22 | 4        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HE21 | 8        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HE22 | 8        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HE21 | 8        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HE22 | 8        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HE21 | 8        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HE22 | 8        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HE21 | 8        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HE22 | 8        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HE21 | 8        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HE22 | 8        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HE21 | 8        | 0.25          |
| (1,632) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HE22 | 8        | 0.25          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 12       | 0.25          |
| (1,615) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:13:LEU:HG   | 4        | 0.25          |
| (1,615) | 1:A:13:LEU:HA   | 1:A:13:LEU:HG   | 8        | 0.25          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:16:LYS:H    | 15       | 0.25          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:6:ALA:HB1   | 17       | 0.25          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:6:ALA:HB2   | 17       | 0.25          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:6:ALA:HB3   | 17       | 0.25          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:6:ALA:HB1   | 19       | 0.25          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:6:ALA:HB2   | 19       | 0.25          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:6:ALA:HB3   | 19       | 0.25          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:12:ILE:H    | 15       | 0.25          |
| (1,500) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:12:ILE:H    | 15       | 0.25          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:13:LEU:HB2  | 15       | 0.25          |
| (1,457) | 1:A:9:ARG:HA    | 1:A:13:LEU:HB3  | 15       | 0.25          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:10:ASP:H    | 1        | 0.25          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:10:ASP:H    | 1        | 0.25          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:10:ASP:H    | 6        | 0.25          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:10:ASP:H    | 6        | 0.25          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:10:ASP:H    | 9        | 0.25          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:10:ASP:H    | 9        | 0.25          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:10:ASP:H    | 12       | 0.25          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3   | 1:A:10:ASP:H    | 12       | 0.25          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2   | 1:A:10:ASP:H    | 14       | 0.25          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3 | 1:A:10:ASP:H   | 14       | 0.25          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA  | 5        | 0.25          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA  | 5        | 0.25          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD1 | 1:A:11:PHE:HA  | 12       | 0.25          |
| (1,399) | 1:A:8:PHE:HD2 | 1:A:11:PHE:HA  | 12       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 1        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 1        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 1        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 1        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 2        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 2        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 2        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 2        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 3        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 3        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 3        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 3        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 5        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 5        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 5        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 5        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 6        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 6        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 6        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 6        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 7        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 7        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 7        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 7        | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 10       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 10       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 10       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 10       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 11       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 11       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 11       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 11       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 12       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 12       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 12       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 12       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 13       | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 13       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 13       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 13       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 14       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 14       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 14       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 14       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 16       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 16       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 16       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 16       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 17       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 17       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 17       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 17       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 18       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 18       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 18       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 18       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 19       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 19       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 19       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 19       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2 | 20       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3 | 20       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2 | 20       | 0.25          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3 | 20       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 1        | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 1        | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 1        | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 1        | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 1        | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 1        | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 1        | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 1        | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 1        | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 1        | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 1        | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 1        | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 3        | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 3        | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 3        | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 3        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 3        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 3        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 3        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 3        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 3        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 3        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 3        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 3        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 4        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 4        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 4        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 4        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 4        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 4        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 4        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 4        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 4        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 4        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 4        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 4        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 6        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 6        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 6        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 6        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 6        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 6        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 6        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 6        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 6        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 6        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 6        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 6        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 7        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 7        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 7        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 7        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 7        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 7        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 7        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 7        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 7        | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 7        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 7        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 7        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 8        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 8        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 8        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 8        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 8        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 8        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 8        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 8        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 8        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 8        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 8        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 8        | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 10       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 10       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 10       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 10       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 10       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 10       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 10       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 10       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 10       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 10       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 10       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 10       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 15       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 15       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 15       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 15       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 15       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 15       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 15       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 15       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 15       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 15       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 15       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 15       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 16       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 16       | 0.25          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 16       | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 16       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 16       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 16       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 16       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 16       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 16       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 16       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 16       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 16       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 18       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 18       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 18       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 18       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 18       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 18       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 18       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 18       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 18       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 18       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 18       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 18       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 20       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 20       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 20       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 20       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 20       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 20       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 20       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 20       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 20       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 20       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 20       | 0.25          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 20       | 0.25          |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 1        | 0.25          |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 2        | 0.25          |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 3        | 0.25          |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 4        | 0.25          |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 5        | 0.25          |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 6        | 0.25          |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 7        | 0.25          |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 8        | 0.25          |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 10       | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 11       | 0.25          |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 12       | 0.25          |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 13       | 0.25          |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 14       | 0.25          |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 15       | 0.25          |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 16       | 0.25          |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 17       | 0.25          |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 18       | 0.25          |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 19       | 0.25          |
| (1,286) | 1:A:7:PHE:HA  | 1:A:8:PHE:H    | 20       | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 1        | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 2        | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 3        | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 4        | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 5        | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 6        | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 7        | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 8        | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 9        | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 10       | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 11       | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 12       | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 13       | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 14       | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 15       | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 16       | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 17       | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 18       | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 19       | 0.25          |
| (1,281) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:7:PHE:HZ   | 20       | 0.25          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 1        | 0.25          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 1        | 0.25          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 1        | 0.25          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 1        | 0.25          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 1        | 0.25          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 1        | 0.25          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 1        | 0.25          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 1        | 0.25          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 1        | 0.25          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 1        | 0.25          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 1        | 0.25          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 1        | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 3        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 3        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 3        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 3        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 3        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 3        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 3        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 3        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 3        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 3        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 3        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 3        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 4        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 4        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 4        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 4        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 4        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 4        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 4        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 4        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 4        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 4        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 4        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 4        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 6        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 6        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 6        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 6        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 6        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 6        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 6        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 6        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 6        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 6        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 6        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 6        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 7        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 7        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 7        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 7        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 7        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 7        | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 7        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 7        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 7        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 7        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 7        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 7        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 8        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 8        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 8        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 8        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 8        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 8        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 8        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 8        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 8        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 8        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 8        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 8        | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 10       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 10       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 10       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 10       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 10       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 10       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 10       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 10       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 10       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 10       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 10       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 10       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 15       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 15       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 15       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 15       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 15       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 15       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 15       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 15       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 15       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 15       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 15       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 15       | 0.25          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 16       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 16       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 16       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 16       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 16       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 16       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 16       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 16       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 16       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 16       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 16       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 16       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 18       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 18       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 18       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 18       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 18       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 18       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 18       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 18       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 18       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 18       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 18       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 18       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 20       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 20       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 20       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 20       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 20       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 20       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 20       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 20       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 20       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 20       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 20       | 0.25          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 20       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 1        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 1        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 1        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 1        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 1        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 1        | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 1        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 1        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 1        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 1        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 1        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 1        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 3        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 3        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 3        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 3        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 3        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 3        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 3        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 3        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 3        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 3        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 3        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 3        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 4        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 4        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 4        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 4        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 4        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 4        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 4        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 4        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 4        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 4        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 4        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 4        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 6        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 6        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 6        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 6        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 6        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 6        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 6        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 6        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 6        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 6        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 6        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 6        | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 7        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 7        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 7        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 7        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 7        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 7        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 7        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 7        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 7        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 7        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 7        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 7        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 8        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 8        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 8        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 8        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 8        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 8        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 8        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 8        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 8        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 8        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 8        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 8        | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 10       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 10       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 10       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 10       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 10       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 10       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 10       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 10       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 10       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 10       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 10       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 10       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 15       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 15       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 15       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 15       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 15       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 15       | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 15       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 15       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 15       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 15       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 15       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 15       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 16       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 16       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 16       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 16       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 16       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 16       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 16       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 16       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 16       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 16       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 16       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 16       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 18       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 18       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 18       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 18       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 18       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 18       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 18       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 18       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 18       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 18       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 18       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 18       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 20       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 20       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 20       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 20       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 20       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 20       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 20       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 20       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 20       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 20       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 20       | 0.25          |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 20       | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB1 | 2        | 0.25          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB2 | 2        | 0.25          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB3 | 2        | 0.25          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB1 | 5        | 0.25          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB2 | 5        | 0.25          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB3 | 5        | 0.25          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB1 | 13       | 0.25          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB2 | 13       | 0.25          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB3 | 13       | 0.25          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB1 | 14       | 0.25          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB2 | 14       | 0.25          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB3 | 14       | 0.25          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB1 | 19       | 0.25          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB2 | 19       | 0.25          |
| (1,164) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:6:ALA:HB3 | 19       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H   | 1        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H   | 1        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H   | 1        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H   | 1        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H   | 1        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H   | 1        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H   | 3        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H   | 3        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H   | 3        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H   | 3        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H   | 3        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H   | 3        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H   | 4        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H   | 4        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H   | 4        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H   | 4        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H   | 4        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H   | 4        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H   | 6        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H   | 6        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H   | 6        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H   | 6        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H   | 6        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H   | 6        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H   | 7        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H   | 7        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H   | 7        | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2      | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-------------|----------|---------------|
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H | 7        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H | 7        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H | 7        | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H | 10       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H | 10       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H | 10       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H | 10       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H | 10       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H | 10       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H | 11       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H | 11       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H | 11       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H | 11       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H | 11       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H | 11       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H | 12       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H | 12       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H | 12       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H | 12       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H | 12       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H | 12       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H | 15       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H | 15       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H | 15       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H | 15       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H | 15       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H | 15       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H | 16       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H | 16       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H | 16       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H | 16       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H | 16       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H | 16       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H | 17       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H | 17       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H | 17       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H | 17       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H | 17       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H | 17       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H | 18       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H | 18       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H | 18       | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H    | 18       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H    | 18       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H    | 18       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H    | 20       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H    | 20       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H    | 20       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H    | 20       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H    | 20       | 0.25          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H    | 20       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD11 | 1        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD12 | 1        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD13 | 1        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD21 | 1        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD22 | 1        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD23 | 1        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD11 | 2        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD12 | 2        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD13 | 2        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD21 | 2        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD22 | 2        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD23 | 2        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD11 | 3        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD12 | 3        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD13 | 3        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD21 | 3        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD22 | 3        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD23 | 3        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD11 | 4        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD12 | 4        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD13 | 4        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD21 | 4        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD22 | 4        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD23 | 4        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD11 | 5        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD12 | 5        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD13 | 5        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD21 | 5        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD22 | 5        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD23 | 5        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD11 | 6        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD12 | 6        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD13 | 6        | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|----------------|----------|---------------|
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 6        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 6        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 6        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 7        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 7        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 7        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 7        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 7        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 7        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 8        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 8        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 8        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 8        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 8        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 8        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 9        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 9        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 9        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 9        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 9        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 9        | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 10       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 10       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 10       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 10       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 10       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 10       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 11       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 11       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 11       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 11       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 11       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 11       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 12       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 12       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 12       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 12       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 12       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 12       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 13       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 13       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 13       | 0.25          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|----------------|----------|---------------|
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 13       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 13       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 13       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 15       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 15       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 15       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 15       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 15       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 15       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 16       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 16       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 16       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 16       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 16       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 16       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 17       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 17       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 17       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 17       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 17       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 17       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 18       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 18       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 18       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 18       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 18       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 18       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 20       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 20       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 20       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 20       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 20       | 0.25          |
| (1,126) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 20       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 1        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 1        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 1        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 1        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 1        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 1        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 2        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 2        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 2        | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|----------------|----------|---------------|
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 2        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 2        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 2        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 3        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 3        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 3        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 3        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 3        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 3        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 4        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 4        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 4        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 4        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 4        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 4        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 5        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 5        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 5        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 5        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 5        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 5        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 6        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 6        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 6        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 6        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 6        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 6        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 7        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 7        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 7        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 7        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 7        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 7        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 8        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 8        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 8        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 8        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 8        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 8        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 9        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 9        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 9        | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|----------------|----------|---------------|
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 9        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 9        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 9        | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 10       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 10       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 10       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 10       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 10       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 10       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 11       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 11       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 11       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 11       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 11       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 11       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 12       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 12       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 12       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 12       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 12       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 12       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 13       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 13       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 13       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 13       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 13       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 13       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 15       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 15       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 15       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 15       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 15       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 15       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 16       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 16       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 16       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD21 | 16       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD22 | 16       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD23 | 16       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD11 | 17       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD12 | 17       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA | 1:A:4:LEU:HD13 | 17       | 0.25          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD21  | 17       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD22  | 17       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD23  | 17       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD11  | 18       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD12  | 18       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD13  | 18       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD21  | 18       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD22  | 18       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD23  | 18       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD11  | 20       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD12  | 20       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD13  | 20       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD21  | 20       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD22  | 20       | 0.25          |
| (1,125) | 1:A:4:LEU:HA   | 1:A:4:LEU:HD23  | 20       | 0.25          |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:8:PHE:H     | 3        | 0.25          |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:8:PHE:H     | 4        | 0.25          |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:8:PHE:H     | 5        | 0.25          |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA   | 1:A:8:PHE:H     | 20       | 0.25          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:H     | 1        | 0.25          |
| (1,110) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:H     | 1        | 0.25          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB2  | 1:A:5:SER:H     | 1        | 0.25          |
| (1,109) | 1:A:3:ARG:HB3  | 1:A:5:SER:H     | 1        | 0.25          |
| (2,27)  | 1:A:11:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HG12 | 8        | 0.24          |
| (2,27)  | 1:A:11:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HG13 | 8        | 0.24          |
| (2,27)  | 1:A:11:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.24          |
| (2,27)  | 1:A:11:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.24          |
| (2,27)  | 1:A:11:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.24          |
| (2,27)  | 1:A:11:PHE:H   | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.24          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD2  | 6        | 0.24          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD3  | 6        | 0.24          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H    | 5        | 0.24          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H    | 5        | 0.24          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H   | 1:A:14:GLN:HG2  | 4        | 0.24          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H   | 1:A:14:GLN:HG3  | 4        | 0.24          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H   | 1:A:14:GLN:HG2  | 8        | 0.24          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H   | 1:A:14:GLN:HG3  | 8        | 0.24          |
| (1,628) | 1:A:13:LEU:HA  | 1:A:14:GLN:H    | 11       | 0.24          |
| (1,614) | 1:A:13:LEU:HA  | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.24          |
| (1,614) | 1:A:13:LEU:HA  | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.24          |
| (1,614) | 1:A:13:LEU:HA  | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.24          |
| (1,614) | 1:A:13:LEU:HA  | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.24          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,614) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.24          |
| (1,614) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.24          |
| (1,614) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.24          |
| (1,614) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.24          |
| (1,614) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.24          |
| (1,614) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.24          |
| (1,614) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.24          |
| (1,614) | 1:A:13:LEU:HA | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.24          |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:14:GLN:HE21 | 11       | 0.24          |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:14:GLN:HE22 | 11       | 0.24          |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:14:GLN:HE21 | 15       | 0.24          |
| (1,551) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:14:GLN:HE22 | 15       | 0.24          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB1   | 2        | 0.24          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB2   | 2        | 0.24          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB3   | 2        | 0.24          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB1   | 5        | 0.24          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB2   | 5        | 0.24          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB3   | 5        | 0.24          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB1   | 13       | 0.24          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB2   | 13       | 0.24          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB3   | 13       | 0.24          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB1   | 14       | 0.24          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB2   | 14       | 0.24          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB3   | 14       | 0.24          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HB2  | 15       | 0.24          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H  | 1:A:11:PHE:HB3  | 15       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.24          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.24          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.24          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.24          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.24          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.24          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 1        | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 1        | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 1        | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 2        | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 2        | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 2        | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 3        | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 3        | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 3        | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 5        | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 5        | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 5        | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 6        | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 6        | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 6        | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 7        | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 7        | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 7        | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 10       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 10       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 10       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 11       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 11       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 11       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 13       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 13       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD13 | 13       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 14       | 0.24          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 14       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 14       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 15       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 15       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 15       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 16       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 16       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 16       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 17       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 17       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 17       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 18       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 18       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 18       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 19       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 19       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 19       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 20       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 20       | 0.24          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 20       | 0.24          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2  | 4        | 0.24          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3  | 4        | 0.24          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2  | 4        | 0.24          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3  | 4        | 0.24          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2  | 8        | 0.24          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3  | 8        | 0.24          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2  | 8        | 0.24          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3  | 8        | 0.24          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2  | 9        | 0.24          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3  | 9        | 0.24          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2  | 9        | 0.24          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3  | 9        | 0.24          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB2  | 15       | 0.24          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:10:ASP:HB3  | 15       | 0.24          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB2  | 15       | 0.24          |
| (1,320) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:10:ASP:HB3  | 15       | 0.24          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 11       | 0.24          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 11       | 0.24          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 11       | 0.24          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 11       | 0.24          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 11       | 0.24          |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 11       | 0.24          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 11       | 0.24          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 11       | 0.24          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 11       | 0.24          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 11       | 0.24          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 11       | 0.24          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 11       | 0.24          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 12       | 0.24          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 12       | 0.24          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 12       | 0.24          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 12       | 0.24          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 12       | 0.24          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 12       | 0.24          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 12       | 0.24          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 12       | 0.24          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 12       | 0.24          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 12       | 0.24          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 12       | 0.24          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 12       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 11       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 11       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 11       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 11       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 11       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 11       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 11       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 11       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 11       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 11       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 11       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 11       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 12       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 12       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 12       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 12       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 12       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 12       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 12       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 12       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 12       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 12       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 12       | 0.24          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 12       | 0.24          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD11 | 11       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD12 | 11       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD13 | 11       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD21 | 11       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD22 | 11       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD23 | 11       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD11 | 11       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD12 | 11       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD13 | 11       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD21 | 11       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD22 | 11       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD23 | 11       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD11 | 12       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD12 | 12       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD13 | 12       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD21 | 12       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD22 | 12       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD23 | 12       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD11 | 12       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD12 | 12       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD13 | 12       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD21 | 12       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD22 | 12       | 0.24          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD23 | 12       | 0.24          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2  | 1:A:8:PHE:H    | 9        | 0.24          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3  | 1:A:8:PHE:H    | 9        | 0.24          |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:7:PHE:HZ   | 17       | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H    | 2        | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H    | 2        | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H    | 2        | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H    | 2        | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H    | 2        | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H    | 2        | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H    | 5        | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H    | 5        | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H    | 5        | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H    | 5        | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H    | 5        | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H    | 5        | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H    | 13       | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H    | 13       | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H    | 13       | 0.24          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21  | 1:A:6:ALA:H     | 13       | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22  | 1:A:6:ALA:H     | 13       | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:6:ALA:H     | 13       | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11  | 1:A:6:ALA:H     | 14       | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12  | 1:A:6:ALA:H     | 14       | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13  | 1:A:6:ALA:H     | 14       | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21  | 1:A:6:ALA:H     | 14       | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22  | 1:A:6:ALA:H     | 14       | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:6:ALA:H     | 14       | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD11  | 1:A:6:ALA:H     | 19       | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD12  | 1:A:6:ALA:H     | 19       | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD13  | 1:A:6:ALA:H     | 19       | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD21  | 1:A:6:ALA:H     | 19       | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD22  | 1:A:6:ALA:H     | 19       | 0.24          |
| (1,163) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:6:ALA:H     | 19       | 0.24          |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:8:PHE:H     | 11       | 0.24          |
| (1,121) | 1:A:3:ARG:HA    | 1:A:8:PHE:H     | 15       | 0.24          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.23          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.23          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.23          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.23          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.23          |
| (2,43)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.23          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG12 | 8        | 0.23          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG13 | 8        | 0.23          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.23          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.23          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.23          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.23          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG12 | 8        | 0.23          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG13 | 8        | 0.23          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.23          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.23          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.23          |
| (2,22)  | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.23          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG12 | 4        | 0.23          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG13 | 4        | 0.23          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.23          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.23          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.23          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.23          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:16:LYS:H    | 3        | 0.23          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:16:LYS:H   | 3        | 0.23          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:16:LYS:H   | 9        | 0.23          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:16:LYS:H   | 9        | 0.23          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:16:LYS:H   | 10       | 0.23          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:16:LYS:H   | 10       | 0.23          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:16:LYS:H   | 16       | 0.23          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:16:LYS:H   | 16       | 0.23          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:16:LYS:H   | 18       | 0.23          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:16:LYS:H   | 18       | 0.23          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.23          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:16:LYS:H   | 20       | 0.23          |
| (1,7)   | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:3:ARG:HA   | 9        | 0.23          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2  | 1:A:15:ARG:H   | 15       | 0.23          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3  | 1:A:15:ARG:H   | 15       | 0.23          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.23          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.23          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.23          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.23          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.23          |
| (1,637) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.23          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.23          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.23          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.23          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.23          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.23          |
| (1,634) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:H   | 15       | 0.23          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HB2 | 15       | 0.23          |
| (1,582) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:13:LEU:HB3 | 15       | 0.23          |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:14:GLN:HA  | 4        | 0.23          |
| (1,516) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:14:GLN:HA  | 8        | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:11:PHE:HB2 | 1        | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:11:PHE:HB3 | 1        | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:11:PHE:HB2 | 2        | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:11:PHE:HB3 | 2        | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:11:PHE:HB2 | 3        | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:11:PHE:HB3 | 3        | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:11:PHE:HB2 | 5        | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:11:PHE:HB3 | 5        | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:11:PHE:HB2 | 7        | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:11:PHE:HB3 | 7        | 0.23          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB2  | 9        | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB3  | 9        | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB2  | 10       | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB3  | 10       | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB2  | 11       | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB3  | 11       | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB2  | 12       | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB3  | 12       | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB2  | 13       | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB3  | 13       | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB2  | 14       | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB3  | 14       | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB2  | 16       | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB3  | 16       | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB2  | 17       | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB3  | 17       | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB2  | 18       | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB3  | 18       | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB2  | 19       | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB3  | 19       | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB2  | 20       | 0.23          |
| (1,490) | 1:A:10:ASP:H | 1:A:11:PHE:HB3  | 20       | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.23          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.23          |
| (1,467) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.23          |
| (1,466) | 1:A:9:ARG:HE | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.23          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD11 | 9        | 0.23          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA | 1:A:12:ILE:HD12 | 9        | 0.23          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 9        | 0.23          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD11 | 12       | 0.23          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD12 | 12       | 0.23          |
| (1,451) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:12:ILE:HD13 | 12       | 0.23          |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HE    | 4        | 0.23          |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HE    | 8        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 1        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 1        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 1        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 1        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 3        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 3        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 3        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 3        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 5        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 5        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 5        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 5        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 7        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 7        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 7        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 7        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 9        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 9        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 9        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 9        | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 10       | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 10       | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 10       | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 10       | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 12       | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 12       | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 12       | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 12       | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 15       | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 15       | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 15       | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 15       | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1  | 17       | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2  | 17       | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 17       | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 17       | 0.23          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 19       | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 19       | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 19       | 0.23          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 19       | 0.23          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 4        | 0.23          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 4        | 0.23          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 4        | 0.23          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 4        | 0.23          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 8        | 0.23          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 8        | 0.23          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 8        | 0.23          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 8        | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2  | 2        | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3  | 2        | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2  | 3        | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3  | 3        | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2  | 5        | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3  | 5        | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2  | 6        | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3  | 6        | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2  | 7        | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3  | 7        | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2  | 9        | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3  | 9        | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2  | 10       | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3  | 10       | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2  | 11       | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3  | 11       | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2  | 12       | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3  | 12       | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2  | 14       | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3  | 14       | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2  | 15       | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3  | 15       | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2  | 18       | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3  | 18       | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2  | 19       | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3  | 19       | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2  | 20       | 0.23          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3  | 20       | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H    | 1        | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H    | 1        | 0.23          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H  | 3        | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H  | 3        | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H  | 4        | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H  | 4        | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H  | 6        | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H  | 6        | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H  | 7        | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H  | 7        | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H  | 8        | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H  | 8        | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H  | 10       | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H  | 10       | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H  | 11       | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H  | 11       | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H  | 12       | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H  | 12       | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H  | 15       | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H  | 15       | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H  | 16       | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H  | 16       | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H  | 18       | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H  | 18       | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H  | 20       | 0.23          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H  | 20       | 0.23          |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HZ | 9        | 0.23          |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HZ | 13       | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:H  | 1        | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:H  | 1        | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:H  | 3        | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:H  | 3        | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:H  | 4        | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:H  | 4        | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:H  | 6        | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:H  | 6        | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:H  | 7        | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:H  | 7        | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:H  | 8        | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:H  | 8        | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:H  | 9        | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:H  | 9        | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:H  | 10       | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:H  | 10       | 0.23          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2   | 1:A:5:SER:H     | 11       | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3   | 1:A:5:SER:H     | 11       | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2   | 1:A:5:SER:H     | 12       | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3   | 1:A:5:SER:H     | 12       | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2   | 1:A:5:SER:H     | 15       | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3   | 1:A:5:SER:H     | 15       | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2   | 1:A:5:SER:H     | 16       | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3   | 1:A:5:SER:H     | 16       | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2   | 1:A:5:SER:H     | 17       | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3   | 1:A:5:SER:H     | 17       | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2   | 1:A:5:SER:H     | 18       | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3   | 1:A:5:SER:H     | 18       | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2   | 1:A:5:SER:H     | 20       | 0.23          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3   | 1:A:5:SER:H     | 20       | 0.23          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2  | 15       | 0.22          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3  | 15       | 0.22          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2  | 15       | 0.22          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3  | 15       | 0.22          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2  | 15       | 0.22          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3  | 15       | 0.22          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE2  | 15       | 0.22          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:16:LYS:HE3  | 15       | 0.22          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE2  | 15       | 0.22          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:16:LYS:HE3  | 15       | 0.22          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE2  | 15       | 0.22          |
| (2,41)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:16:LYS:HE3  | 15       | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG12 | 3        | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG13 | 3        | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG12 | 3        | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG13 | 3        | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG12 | 5        | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG13 | 5        | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.22          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 5        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 5        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 9        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 9        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 9        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 9        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 11       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 11       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 11       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 11       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 13       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 13       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 13       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 13       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.22          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 16       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 16       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 16       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 16       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 17       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 17       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 17       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 17       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 19       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 19       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 19       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 19       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 20       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 20       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.22          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.22          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 20       | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 20       | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 20       | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 20       | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 20       | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG12 | 5        | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG13 | 5        | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 5        | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG22 | 5        | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG23 | 5        | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG12 | 9        | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG13 | 9        | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 9        | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG22 | 9        | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG23 | 9        | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG12 | 16       | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG13 | 16       | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 16       | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG22 | 16       | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG23 | 16       | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG12 | 17       | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG13 | 17       | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 17       | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG22 | 17       | 0.22          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG23 | 17       | 0.22          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD2  | 12       | 0.22          |
| (1,735) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HD3  | 12       | 0.22          |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H   | 1:A:16:LYS:HA   | 15       | 0.22          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H    | 1        | 0.22          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H    | 1        | 0.22          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H    | 2        | 0.22          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H    | 2        | 0.22          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H    | 5        | 0.22          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H    | 5        | 0.22          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H    | 6        | 0.22          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H    | 6        | 0.22          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H    | 7        | 0.22          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H    | 7        | 0.22          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H    | 12       | 0.22          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H    | 12       | 0.22          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H    | 13       | 0.22          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H    | 13       | 0.22          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H    | 14       | 0.22          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H    | 14       | 0.22          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H    | 17       | 0.22          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H    | 17       | 0.22          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:16:LYS:H    | 19       | 0.22          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:16:LYS:H    | 19       | 0.22          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG2 | 1:A:17:LYS:HA   | 11       | 0.22          |
| (1,679) | 1:A:14:GLN:HG3 | 1:A:17:LYS:HA   | 11       | 0.22          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H   | 1:A:14:GLN:HG2  | 15       | 0.22          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H   | 1:A:14:GLN:HG3  | 15       | 0.22          |
| (1,593) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 4        | 0.22          |
| (1,593) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 4        | 0.22          |
| (1,593) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 8        | 0.22          |
| (1,593) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 8        | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.22          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.22          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.22          |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA   | 4        | 0.22          |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA   | 4        | 0.22          |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA   | 8        | 0.22          |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA   | 8        | 0.22          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 1        | 0.22          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 1        | 0.22          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 9        | 0.22          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 9        | 0.22          |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:9:ARG:HE    | 6        | 0.22          |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:9:ARG:HE    | 9        | 0.22          |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:9:ARG:HE    | 13       | 0.22          |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:9:ARG:HE    | 14       | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HD2  | 4        | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HD3  | 4        | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HD2  | 4        | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HD3  | 4        | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HD2  | 8        | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HD3  | 8        | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HD2  | 8        | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HD3  | 8        | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HD2  | 12       | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HD3  | 12       | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HD2  | 12       | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HD3  | 12       | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HD2  | 15       | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HD3  | 15       | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HD2  | 15       | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HD3  | 15       | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HD2  | 19       | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:15:ARG:HD3  | 19       | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HD2  | 19       | 0.22          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:15:ARG:HD3  | 19       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HE1  | 2        | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HE2  | 2        | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HE1  | 2        | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HE2  | 2        | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HE1  | 4        | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HE2  | 4        | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HE1  | 4        | 0.22          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 4        | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 6        | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 6        | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 6        | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 6        | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 8        | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 8        | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 8        | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 8        | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 11       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 11       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 11       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 11       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 13       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 13       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 13       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 13       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 14       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 14       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 14       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 14       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 16       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 16       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 16       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 18       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 18       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE1 | 20       | 0.22          |
| (1,332) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HE2 | 20       | 0.22          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2  | 1        | 0.22          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3  | 1        | 0.22          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2  | 4        | 0.22          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3  | 4        | 0.22          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2  | 8        | 0.22          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3  | 8        | 0.22          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2  | 13       | 0.22          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3  | 13       | 0.22          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2  | 16       | 0.22          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3 | 16       | 0.22          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB2 | 17       | 0.22          |
| (1,248) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:7:PHE:HB3 | 17       | 0.22          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 2        | 0.22          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 2        | 0.22          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 5        | 0.22          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 5        | 0.22          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 13       | 0.22          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 13       | 0.22          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 14       | 0.22          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 14       | 0.22          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 17       | 0.22          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 17       | 0.22          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 19       | 0.22          |
| (1,238) | 1:A:5:SER:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 19       | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 2        | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 2        | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.22          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.22          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 2        | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 2        | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.22          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.22          |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HZ  | 2        | 0.22          |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HZ  | 5        | 0.22          |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:7:PHE:HZ  | 19       | 0.22          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:H   | 2        | 0.22          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:H   | 2        | 0.22          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:H     | 5        | 0.22          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:H     | 5        | 0.22          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:H     | 13       | 0.22          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:H     | 13       | 0.22          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:H     | 14       | 0.22          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:H     | 14       | 0.22          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:H     | 19       | 0.22          |
| (1,144) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:H     | 19       | 0.22          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 1        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 1        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 1        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 1        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 1        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 1        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 1        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 2        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 2        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 2        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 2        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 2        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 2        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 2        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 6        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 6        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 6        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 6        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 6        | 0.21          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|--------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 6        | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 6        | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 7        | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 7        | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 7        | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 7        | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 7        | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 7        | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 7        | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 10       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 10       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 10       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 10       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 10       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 10       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 10       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 14       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 14       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG12 | 14       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG13 | 14       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG12 | 18       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG13 | 18       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.21          |
| (2,25) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.21          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG12 | 18       | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG13 | 18       | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG12 | 3        | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG13 | 3        | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 3        | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG22 | 3        | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG23 | 3        | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG12 | 13       | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG13 | 13       | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 13       | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG22 | 13       | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG23 | 13       | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG12 | 14       | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG13 | 14       | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 14       | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG22 | 14       | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG23 | 14       | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG12 | 18       | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG13 | 18       | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 18       | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG22 | 18       | 0.21          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG23 | 18       | 0.21          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG12 | 19       | 0.21          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG13 | 19       | 0.21          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.21          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG21 | 19       | 0.21          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG22 | 19       | 0.21          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:12:ILE:HG23 | 19       | 0.21          |
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HG2  | 12       | 0.21          |
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HG3  | 12       | 0.21          |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA   | 5        | 0.21          |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA   | 5        | 0.21          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA   | 7        | 0.21          |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA   | 7        | 0.21          |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA   | 10       | 0.21          |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA   | 10       | 0.21          |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA   | 13       | 0.21          |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA   | 13       | 0.21          |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA   | 14       | 0.21          |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA   | 14       | 0.21          |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA   | 16       | 0.21          |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA   | 16       | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2  | 4        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3  | 4        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2  | 4        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3  | 4        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2  | 4        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3  | 4        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:HE2  | 4        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:HE3  | 4        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:HE2  | 4        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:HE3  | 4        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:HE2  | 4        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:HE3  | 4        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:HE2  | 8        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:16:LYS:HE3  | 8        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:HE2  | 8        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:16:LYS:HE3  | 8        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:HE2  | 8        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:16:LYS:HE3  | 8        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:HE2  | 8        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:16:LYS:HE3  | 8        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:HE2  | 8        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:16:LYS:HE3  | 8        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:HE2  | 8        | 0.21          |
| (1,650) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:16:LYS:HE3  | 8        | 0.21          |
| (1,596) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:14:GLN:HE21 | 8        | 0.21          |
| (1,596) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:14:GLN:HE22 | 8        | 0.21          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:14:GLN:H    | 11       | 0.21          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:14:GLN:H    | 11       | 0.21          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:14:GLN:H    | 11       | 0.21          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:14:GLN:H    | 11       | 0.21          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:14:GLN:HE21 | 11       | 0.21          |
| (1,517) | 1:A:10:ASP:HA   | 1:A:14:GLN:HE22 | 11       | 0.21          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.21          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.21          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.21          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.21          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.21          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.21          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:10:ASP:H    | 4        | 0.21          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:10:ASP:H    | 4        | 0.21          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD2  | 1:A:10:ASP:H    | 8        | 0.21          |
| (1,437) | 1:A:9:ARG:HD3  | 1:A:10:ASP:H    | 8        | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 2        | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 2        | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 3        | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 3        | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 4        | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 4        | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 5        | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 5        | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 6        | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 6        | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 7        | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 7        | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 8        | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 8        | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 10       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 10       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 11       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 11       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 12       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 12       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 13       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 13       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 14       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 14       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2  | 1:A:10:ASP:H    | 15       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3  | 1:A:10:ASP:H    | 15       | 0.21          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 16       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 16       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 17       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 17       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 18       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 18       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 19       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 19       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB2 | 1:A:10:ASP:H   | 20       | 0.21          |
| (1,436) | 1:A:9:ARG:HB3 | 1:A:10:ASP:H   | 20       | 0.21          |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HE   | 1        | 0.21          |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HE   | 2        | 0.21          |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HE   | 3        | 0.21          |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HE   | 5        | 0.21          |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HE   | 7        | 0.21          |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HE   | 10       | 0.21          |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HE   | 11       | 0.21          |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HE   | 15       | 0.21          |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HE   | 16       | 0.21          |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HE   | 17       | 0.21          |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HE   | 18       | 0.21          |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:9:ARG:HE   | 20       | 0.21          |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 1        | 0.21          |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 1        | 0.21          |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.21          |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.21          |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 12       | 0.21          |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 12       | 0.21          |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 16       | 0.21          |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 16       | 0.21          |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 20       | 0.21          |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 20       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD2 | 1        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD3 | 1        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD2 | 1        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD3 | 1        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD2 | 2        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD3 | 2        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD2 | 2        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD3 | 2        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD2 | 3        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD3 | 3        | 0.21          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD2 | 3        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD3 | 3        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD2 | 6        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD3 | 6        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD2 | 6        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD3 | 6        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD2 | 7        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD3 | 7        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD2 | 7        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD3 | 7        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD2 | 9        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD3 | 9        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD2 | 9        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD3 | 9        | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD2 | 10       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD3 | 10       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD2 | 10       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD3 | 10       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD2 | 13       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD3 | 13       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD2 | 13       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD3 | 13       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD2 | 14       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD3 | 14       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD2 | 14       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD3 | 14       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD2 | 16       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD3 | 16       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD2 | 16       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD3 | 16       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD2 | 17       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD3 | 17       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD2 | 17       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD3 | 17       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD2 | 18       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD3 | 18       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD2 | 18       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD3 | 18       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD2 | 20       | 0.21          |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD3 | 20       | 0.21          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 14       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 14       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 14       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 14       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 14       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 14       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 14       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 14       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 14       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 14       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 14       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 14       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 17       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 17       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 17       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 17       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 17       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 17       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 17       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 17       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 17       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 17       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 17       | 0.21          |
| (1,31) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 17       | 0.21          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 14       | 0.21          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 14       | 0.21          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 14       | 0.21          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 14       | 0.21          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 14       | 0.21          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 14       | 0.21          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 14       | 0.21          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 14       | 0.21          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 14       | 0.21          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 14       | 0.21          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 14       | 0.21          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 14       | 0.21          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 17       | 0.21          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 17       | 0.21          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 17       | 0.21          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 17       | 0.21          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 17       | 0.21          |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 17       | 0.21          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 17       | 0.21          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 17       | 0.21          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 17       | 0.21          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 17       | 0.21          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 17       | 0.21          |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 17       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 14       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 14       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 14       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 14       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 14       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 14       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 14       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 14       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 14       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 14       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 14       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 14       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 17       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 17       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 17       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 17       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 17       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 17       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 17       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 17       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 17       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 17       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 17       | 0.21          |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 17       | 0.21          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 9        | 0.21          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 9        | 0.21          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 19       | 0.21          |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 19       | 0.21          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 9        | 0.21          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 9        | 0.21          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 19       | 0.21          |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 19       | 0.21          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:8:PHE:HD1  | 3        | 0.21          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:8:PHE:HD2  | 3        | 0.21          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:8:PHE:HD1  | 4        | 0.21          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG  | 1:A:8:PHE:HD2  | 4        | 0.21          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD1 | 6        | 0.21          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD2 | 6        | 0.21          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD1 | 7        | 0.21          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD2 | 7        | 0.21          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD1 | 8        | 0.21          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD2 | 8        | 0.21          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD1 | 10       | 0.21          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD2 | 10       | 0.21          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD1 | 16       | 0.21          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD2 | 16       | 0.21          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD1 | 18       | 0.21          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD2 | 18       | 0.21          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD1 | 20       | 0.21          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD2 | 20       | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.21          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.21          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.21          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:8:PHE:HB2   | 19       | 0.21          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:8:PHE:HB3   | 19       | 0.21          |
| (1,186) | 1:A:4:LEU:HG    | 1:A:7:PHE:HZ    | 14       | 0.21          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG12 | 12       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG13 | 12       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG12 | 12       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG13 | 12       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 12       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 12       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG23 | 12       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG12 | 15       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG13 | 15       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG12 | 15       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG13 | 15       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 15       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 15       | 0.2           |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG23 | 15       | 0.2           |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG12 | 11       | 0.2           |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG13 | 11       | 0.2           |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.2           |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 11       | 0.2           |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG22 | 11       | 0.2           |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:12:ILE:HG23 | 11       | 0.2           |
| (1,716) | 1:A:15:ARG:H    | 1:A:16:LYS:HA   | 11       | 0.2           |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:16:LYS:H    | 15       | 0.2           |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:16:LYS:H    | 15       | 0.2           |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA   | 1        | 0.2           |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA   | 1        | 0.2           |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA   | 2        | 0.2           |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA   | 2        | 0.2           |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA   | 3        | 0.2           |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA   | 3        | 0.2           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA   | 6        | 0.2           |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA   | 6        | 0.2           |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA   | 9        | 0.2           |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA   | 9        | 0.2           |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA   | 12       | 0.2           |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA   | 12       | 0.2           |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA   | 17       | 0.2           |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA   | 17       | 0.2           |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA   | 18       | 0.2           |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA   | 18       | 0.2           |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA   | 19       | 0.2           |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA   | 19       | 0.2           |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:17:LYS:HA   | 20       | 0.2           |
| (1,678) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:17:LYS:HA   | 20       | 0.2           |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:17:LYS:H    | 11       | 0.2           |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H    | 1:A:14:GLN:HG2  | 19       | 0.2           |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H    | 1:A:14:GLN:HG3  | 19       | 0.2           |
| (1,596) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:14:GLN:HE21 | 4        | 0.2           |
| (1,596) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:14:GLN:HE22 | 4        | 0.2           |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:14:GLN:H    | 2        | 0.2           |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:14:GLN:H    | 2        | 0.2           |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:14:GLN:H    | 9        | 0.2           |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:14:GLN:H    | 9        | 0.2           |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:14:GLN:H    | 10       | 0.2           |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:14:GLN:H    | 10       | 0.2           |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:14:GLN:H    | 13       | 0.2           |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:14:GLN:H    | 13       | 0.2           |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:14:GLN:H    | 17       | 0.2           |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:14:GLN:H    | 17       | 0.2           |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:14:GLN:H    | 18       | 0.2           |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:14:GLN:H    | 18       | 0.2           |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:14:GLN:H    | 2        | 0.2           |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:14:GLN:H    | 2        | 0.2           |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:14:GLN:H    | 9        | 0.2           |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:14:GLN:H    | 9        | 0.2           |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:14:GLN:H    | 10       | 0.2           |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:14:GLN:H    | 10       | 0.2           |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:14:GLN:H    | 13       | 0.2           |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:14:GLN:H    | 13       | 0.2           |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:14:GLN:H    | 17       | 0.2           |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3  | 1:A:14:GLN:H    | 17       | 0.2           |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2  | 1:A:14:GLN:H    | 18       | 0.2           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H   | 18       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 1        | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 1        | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 2        | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 2        | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 3        | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 3        | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 5        | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 5        | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 6        | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 6        | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 7        | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 7        | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 9        | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 9        | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 10       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 10       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 11       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 11       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 12       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 12       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 13       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 13       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 14       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 14       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 15       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 15       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 16       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 16       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 17       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 17       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 18       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 18       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 19       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 19       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA  | 20       | 0.2           |
| (1,481) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA  | 20       | 0.2           |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:9:ARG:HE   | 12       | 0.2           |
| (1,417) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:9:ARG:HE   | 19       | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:11:PHE:HB2 | 2        | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:11:PHE:HB3 | 2        | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:11:PHE:HB2 | 3        | 0.2           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 3        | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 4        | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 4        | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 5        | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 5        | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 7        | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 7        | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 8        | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 8        | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 9        | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 9        | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 10       | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 10       | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 11       | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 11       | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 13       | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 13       | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 14       | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 14       | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 15       | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 15       | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 17       | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 17       | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 18       | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 18       | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB2 | 19       | 0.2           |
| (1,406) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:HB3 | 19       | 0.2           |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD2 | 5        | 0.2           |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD3 | 5        | 0.2           |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD2 | 5        | 0.2           |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD3 | 5        | 0.2           |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD2 | 11       | 0.2           |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:15:ARG:HD3 | 11       | 0.2           |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD2 | 11       | 0.2           |
| (1,363) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:15:ARG:HD3 | 11       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 2        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 2        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 2        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 2        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 2        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 2        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 2        | 0.2           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 2        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 2        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 2        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 2        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 2        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 5        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 5        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 5        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 5        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 5        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 5        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 5        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 5        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 5        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 5        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 5        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 5        | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 13       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 13       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 13       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 13       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 13       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 13       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 13       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 13       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 13       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 13       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 13       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 13       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 19       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 19       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 19       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 19       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 19       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 19       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 19       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 19       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 19       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 19       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 19       | 0.2           |
| (1,31)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 19       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 1        | 0.2           |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 1        | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 2        | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 2        | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 3        | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 3        | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 4        | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 4        | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 5        | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 5        | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 6        | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 6        | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 7        | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 7        | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 8        | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 8        | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 9        | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 9        | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 10       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 10       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 11       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 11       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 12       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 12       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 13       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 13       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 14       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 14       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 15       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 15       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 16       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 16       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 17       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 17       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 18       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 18       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 19       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 19       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 20       | 0.2           |
| (1,299) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 20       | 0.2           |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HA   | 4        | 0.2           |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H   | 1:A:8:PHE:HA   | 8        | 0.2           |
| (1,27)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 2        | 0.2           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 2        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 2        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 2        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 2        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 2        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 2        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 2        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 2        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 2        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 2        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 2        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 5        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 5        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 5        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 5        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 5        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 5        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 5        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 5        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 5        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 5        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 5        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 5        | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 13       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 13       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 13       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 13       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 13       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 13       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 13       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 13       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 13       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 13       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 13       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 13       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 19       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 19       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 19       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 19       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 19       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 19       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 19       | 0.2           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 19       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 19       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 19       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 19       | 0.2           |
| (1,27) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 19       | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 2        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 2        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 2        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 2        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 2        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 2        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 2        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 2        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 2        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 2        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 2        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 2        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 5        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 5        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 5        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 5        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 5        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 5        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 5        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 5        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 5        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 5        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 5        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 5        | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 13       | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 13       | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 13       | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 13       | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 13       | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 13       | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 13       | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 13       | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 13       | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 13       | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 13       | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 13       | 0.2           |
| (1,26) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 19       | 0.2           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD12 | 19       | 0.2           |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD13 | 19       | 0.2           |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD21 | 19       | 0.2           |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD22 | 19       | 0.2           |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD23 | 19       | 0.2           |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD11 | 19       | 0.2           |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD12 | 19       | 0.2           |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD13 | 19       | 0.2           |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD21 | 19       | 0.2           |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD22 | 19       | 0.2           |
| (1,26)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD23 | 19       | 0.2           |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:HB2  | 4        | 0.2           |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:HB3  | 4        | 0.2           |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:HB2  | 8        | 0.2           |
| (1,207) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:HB3  | 8        | 0.2           |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:HB2  | 4        | 0.2           |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:HB3  | 4        | 0.2           |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:HB2  | 8        | 0.2           |
| (1,206) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:8:PHE:HB3  | 8        | 0.2           |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD1  | 1        | 0.2           |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD2  | 1        | 0.2           |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD1  | 11       | 0.2           |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD2  | 11       | 0.2           |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD1  | 12       | 0.2           |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD2  | 12       | 0.2           |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD1  | 15       | 0.2           |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD2  | 15       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2  | 2        | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3  | 2        | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2  | 2        | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3  | 2        | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2  | 2        | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3  | 2        | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2  | 2        | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3  | 2        | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2  | 2        | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3  | 2        | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2  | 2        | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3  | 2        | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2  | 13       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3  | 13       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2  | 13       | 0.2           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.2           |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 2        | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 2        | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 2        | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 2        | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 2        | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 2        | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 2        | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 2        | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 2        | 0.2           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 2        | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 2        | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 2        | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.2           |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.2           |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB2 | 9        | 0.2           |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB3 | 9        | 0.2           |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB2 | 9        | 0.2           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3   | 9        | 0.2           |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2   | 9        | 0.2           |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3   | 9        | 0.2           |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2   | 9        | 0.2           |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3   | 9        | 0.2           |
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2  | 1        | 0.19          |
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3  | 1        | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG2  | 1        | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG3  | 1        | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG2  | 2        | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG3  | 2        | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG2  | 3        | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG3  | 3        | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG2  | 5        | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG3  | 5        | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG2  | 6        | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG3  | 6        | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG2  | 7        | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG3  | 7        | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG2  | 9        | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG3  | 9        | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG2  | 10       | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG3  | 10       | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG2  | 12       | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG3  | 12       | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG2  | 13       | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG3  | 13       | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG2  | 14       | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG3  | 14       | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG2  | 16       | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG3  | 16       | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG2  | 17       | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG3  | 17       | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG2  | 18       | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG3  | 18       | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG2  | 20       | 0.19          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H  | 1:A:14:GLN:HG3  | 20       | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:HE21 | 1        | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:HE22 | 1        | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:HE21 | 2        | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:HE22 | 2        | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG | 1:A:14:GLN:HE21 | 6        | 0.19          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE22 | 6        | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE21 | 9        | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE22 | 9        | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE21 | 10       | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE22 | 10       | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE21 | 13       | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE22 | 13       | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE21 | 14       | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE22 | 14       | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE21 | 16       | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE22 | 16       | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE21 | 17       | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE22 | 17       | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE21 | 18       | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE22 | 18       | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE21 | 20       | 0.19          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE22 | 20       | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 1        | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 1        | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 3        | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 3        | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 5        | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 5        | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 6        | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 6        | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 7        | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 7        | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 12       | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 12       | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 14       | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 14       | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 15       | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 15       | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 16       | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 16       | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 19       | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 19       | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.19          |
| (1,520) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 1        | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 1        | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 3        | 0.19          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 3        | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 5        | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 5        | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 6        | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 6        | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 7        | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 7        | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 12       | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 12       | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 14       | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 14       | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 15       | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 15       | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 16       | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 16       | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 19       | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 19       | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.19          |
| (1,519) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:14:GLN:H    | 20       | 0.19          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.19          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.19          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.19          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.19          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.19          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.19          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.19          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.19          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.19          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.19          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.19          |
| (1,509) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.19          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:11:PHE:H    | 16       | 0.19          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:11:PHE:H    | 20       | 0.19          |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HA    | 1        | 0.19          |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HA    | 2        | 0.19          |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HA    | 3        | 0.19          |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HA    | 5        | 0.19          |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HA    | 6        | 0.19          |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HA    | 7        | 0.19          |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HA    | 9        | 0.19          |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HA    | 10       | 0.19          |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HA    | 11       | 0.19          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HA  | 12       | 0.19          |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HA  | 13       | 0.19          |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HA  | 14       | 0.19          |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HA  | 15       | 0.19          |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HA  | 16       | 0.19          |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HA  | 17       | 0.19          |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HA  | 18       | 0.19          |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HA  | 19       | 0.19          |
| (1,298) | 1:A:7:PHE:H    | 1:A:8:PHE:HA  | 20       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.19          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.19          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.19          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.19          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.19          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.19          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.19          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.19          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB2 | 1        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB3 | 1        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB2 | 1        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB3 | 1        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB2 | 2        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB3 | 2        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB2 | 2        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB3 | 2        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB2 | 3        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB3 | 3        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB2 | 3        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB3 | 3        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB2 | 4        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB3 | 4        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB2 | 4        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB3 | 4        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB2 | 5        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB3 | 5        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB2 | 5        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3  | 1:A:5:SER:HB3 | 5        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2  | 1:A:5:SER:HB2 | 6        | 0.19          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 6        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 6        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 6        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 7        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 7        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 7        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 7        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 8        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 8        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 8        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 8        | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 10       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 10       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 10       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 10       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 11       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 11       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 11       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 11       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 12       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 12       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 12       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 12       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 13       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 13       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 13       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 13       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 14       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 14       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 14       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 14       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 15       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 15       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 15       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 15       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 16       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 16       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 16       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 16       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 17       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 17       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 17       | 0.19          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 17       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 18       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 18       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 18       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 18       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 19       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 19       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 19       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 19       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 20       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 20       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 20       | 0.19          |
| (1,146) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 20       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 1        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 1        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 1        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 1        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 2        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 2        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 2        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 2        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 3        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 3        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 3        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 3        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 4        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 4        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 4        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 4        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 5        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 5        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 5        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 5        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 6        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 6        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 6        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 6        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 7        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 7        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 7        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 7        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 8        | 0.19          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 8        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 8        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 8        | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 10       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 10       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 10       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 10       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 11       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 11       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 11       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 11       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 12       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 12       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 12       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 12       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 13       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 13       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 13       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 13       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 14       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 14       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 14       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 14       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 15       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 15       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 15       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 15       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 16       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 16       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 16       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 16       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 17       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 17       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 17       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 17       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 18       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 18       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 18       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB3 | 18       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB2 | 19       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2 | 1:A:5:SER:HB3 | 19       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3 | 1:A:5:SER:HB2 | 19       | 0.19          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3   | 1:A:5:SER:HB3  | 19       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2   | 1:A:5:SER:HB2  | 20       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB2   | 1:A:5:SER:HB3  | 20       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3   | 1:A:5:SER:HB2  | 20       | 0.19          |
| (1,145) | 1:A:4:LEU:HB3   | 1:A:5:SER:HB3  | 20       | 0.19          |
| (3,10)  | 1:A:10:ASP:O    | 1:A:14:GLN:N   | 4        | 0.18          |
| (3,10)  | 1:A:10:ASP:O    | 1:A:14:GLN:N   | 8        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 1        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 1        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 1        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 1        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 1        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 1        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB2 | 1        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB3 | 1        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB2 | 1        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB3 | 1        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB2 | 1        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB3 | 1        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 2        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 2        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 2        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 2        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 2        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 2        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB2 | 2        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB3 | 2        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB2 | 2        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB3 | 2        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB2 | 2        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB3 | 2        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 3        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 3        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 3        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 3        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 3        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 3        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB2 | 3        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB3 | 3        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB2 | 3        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB3 | 3        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB2 | 3        | 0.18          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB3 | 3        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 5        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 5        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 5        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 5        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 5        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 5        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB2 | 5        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB3 | 5        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB2 | 5        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB3 | 5        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB2 | 5        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB3 | 5        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 6        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 6        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 6        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 6        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 6        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 6        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB2 | 6        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB3 | 6        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB2 | 6        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB3 | 6        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB2 | 6        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB3 | 6        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 7        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 7        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 7        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 7        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 7        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 7        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB2 | 7        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB3 | 7        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB2 | 7        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB3 | 7        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB2 | 7        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB3 | 7        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 9        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 9        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 9        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 9        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 9        | 0.18          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 9        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB2 | 9        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB3 | 9        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB2 | 9        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB3 | 9        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB2 | 9        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB3 | 9        | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 10       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 10       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 10       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 10       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 10       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 10       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB2 | 10       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB3 | 10       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB2 | 10       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB3 | 10       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB2 | 10       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB3 | 10       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 11       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 11       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 11       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 11       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 11       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 11       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB2 | 11       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB3 | 11       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB2 | 11       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB3 | 11       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB2 | 11       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB3 | 11       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 12       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 12       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 12       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 12       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 12       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 12       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB2 | 12       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB3 | 12       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB2 | 12       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB3 | 12       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB2 | 12       | 0.18          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB3 | 12       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 13       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 13       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 13       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 13       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 13       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 13       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB2 | 13       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB3 | 13       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB2 | 13       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB3 | 13       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB2 | 13       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB3 | 13       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 14       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 14       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 14       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 14       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 14       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 14       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB2 | 14       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB3 | 14       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB2 | 14       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB3 | 14       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB2 | 14       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB3 | 14       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 16       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 16       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 16       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 16       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 16       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 16       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB2 | 16       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB3 | 16       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB2 | 16       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB3 | 16       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB2 | 16       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB3 | 16       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 17       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 17       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 17       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 17       | 0.18          |
| (2,31) | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 17       | 0.18          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3  | 17       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB2  | 17       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB3  | 17       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB2  | 17       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB3  | 17       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB2  | 17       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB3  | 17       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2  | 18       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3  | 18       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2  | 18       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3  | 18       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2  | 18       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3  | 18       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB2  | 18       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB3  | 18       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB2  | 18       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB3  | 18       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB2  | 18       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB3  | 18       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2  | 20       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3  | 20       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2  | 20       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3  | 20       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2  | 20       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3  | 20       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB2  | 20       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB3  | 20       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB2  | 20       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB3  | 20       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB2  | 20       | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB3  | 20       | 0.18          |
| (1,745) | 1:A:17:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HG2  | 11       | 0.18          |
| (1,745) | 1:A:17:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HG3  | 11       | 0.18          |
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HG2  | 19       | 0.18          |
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HG3  | 19       | 0.18          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:17:LYS:H    | 4        | 0.18          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:17:LYS:H    | 4        | 0.18          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:17:LYS:H    | 8        | 0.18          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:17:LYS:H    | 8        | 0.18          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:14:GLN:HE21 | 3        | 0.18          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:14:GLN:HE22 | 3        | 0.18          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG   | 1:A:14:GLN:HE21 | 5        | 0.18          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE22 | 5        | 0.18          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE21 | 7        | 0.18          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE22 | 7        | 0.18          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE21 | 12       | 0.18          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE22 | 12       | 0.18          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE21 | 19       | 0.18          |
| (1,639) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:HE22 | 19       | 0.18          |
| (1,610) | 1:A:12:ILE:HA  | 1:A:16:LYS:H    | 11       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 1        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 1        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 1        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 1        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 2        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 2        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 2        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 2        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 3        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 3        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 3        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 3        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 5        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 5        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 5        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 5        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 6        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 6        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 6        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 6        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 7        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 7        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 7        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 7        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 9        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 9        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 9        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 9        | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 10       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 10       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 10       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 10       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 11       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 11       | 0.18          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 11       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 11       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 12       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 12       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 12       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 12       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 13       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 13       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 13       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 13       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 14       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 14       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 14       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 14       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 15       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 15       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 15       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 15       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 16       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 16       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 16       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 16       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 17       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 17       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 17       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 17       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 18       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 18       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 18       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 18       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 19       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 19       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 19       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 19       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE1  | 20       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2 | 1:A:11:PHE:HE2  | 20       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE1  | 20       | 0.18          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3 | 1:A:11:PHE:HE2  | 20       | 0.18          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.18          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.18          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.18          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.18          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.18          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.18          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H    | 1        | 0.18          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H    | 2        | 0.18          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H    | 3        | 0.18          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H    | 5        | 0.18          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H    | 6        | 0.18          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H    | 7        | 0.18          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H    | 9        | 0.18          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H    | 10       | 0.18          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H    | 11       | 0.18          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H    | 12       | 0.18          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H    | 13       | 0.18          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H    | 14       | 0.18          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H    | 15       | 0.18          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H    | 17       | 0.18          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H    | 18       | 0.18          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ  | 1:A:11:PHE:H    | 19       | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD1 | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.18          |
| (1,355) | 1:A:7:PHE:HD2 | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.18          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:9:ARG:HG2 | 4        | 0.18          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:9:ARG:HG3 | 4        | 0.18          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:9:ARG:HG2 | 8        | 0.18          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:9:ARG:HG3 | 8        | 0.18          |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:8:PHE:HZ  | 4        | 0.18          |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ   | 1:A:8:PHE:HZ  | 8        | 0.18          |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA   | 1:A:9:ARG:HE  | 4        | 0.18          |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA   | 1:A:9:ARG:HE  | 8        | 0.18          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD1 | 9        | 0.18          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD2 | 9        | 0.18          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD1 | 17       | 0.18          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD2 | 17       | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 8        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 8        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 8        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 8        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 8        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 8        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 8        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 8        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 8        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 8        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 8        | 0.18          |
| (1,200) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 8        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.18          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21  | 1:A:8:PHE:HB2  | 4        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21  | 1:A:8:PHE:HB3  | 4        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22  | 1:A:8:PHE:HB2  | 4        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22  | 1:A:8:PHE:HB3  | 4        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:8:PHE:HB2  | 4        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:8:PHE:HB3  | 4        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11  | 1:A:8:PHE:HB2  | 8        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD11  | 1:A:8:PHE:HB3  | 8        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12  | 1:A:8:PHE:HB2  | 8        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD12  | 1:A:8:PHE:HB3  | 8        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13  | 1:A:8:PHE:HB2  | 8        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD13  | 1:A:8:PHE:HB3  | 8        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21  | 1:A:8:PHE:HB2  | 8        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD21  | 1:A:8:PHE:HB3  | 8        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22  | 1:A:8:PHE:HB2  | 8        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD22  | 1:A:8:PHE:HB3  | 8        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:8:PHE:HB2  | 8        | 0.18          |
| (1,193) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:8:PHE:HB3  | 8        | 0.18          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2 | 19       | 0.17          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3 | 19       | 0.17          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2 | 19       | 0.17          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3 | 19       | 0.17          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2 | 19       | 0.17          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3 | 19       | 0.17          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB2 | 19       | 0.17          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB3 | 19       | 0.17          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB2 | 19       | 0.17          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB3 | 19       | 0.17          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB2 | 19       | 0.17          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB3 | 19       | 0.17          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:17:LYS:H   | 11       | 0.17          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:17:LYS:H   | 11       | 0.17          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:17:LYS:H   | 12       | 0.17          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:17:LYS:H   | 12       | 0.17          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:17:LYS:H   | 19       | 0.17          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:17:LYS:H   | 19       | 0.17          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:16:LYS:H   | 11       | 0.17          |
| (1,712) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:16:LYS:H   | 11       | 0.17          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2  | 1:A:15:ARG:H   | 4        | 0.17          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3  | 1:A:15:ARG:H   | 4        | 0.17          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD2  | 1:A:15:ARG:H   | 8        | 0.17          |
| (1,698) | 1:A:15:ARG:HD3  | 1:A:15:ARG:H   | 8        | 0.17          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,668) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.17          |
| (1,668) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.17          |
| (1,668) | 1:A:14:GLN:HE21 | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.17          |
| (1,668) | 1:A:14:GLN:HE22 | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.17          |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 4        | 0.17          |
| (1,597) | 1:A:12:ILE:HA   | 1:A:14:GLN:H    | 8        | 0.17          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:6:ALA:HB1   | 1        | 0.17          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:6:ALA:HB2   | 1        | 0.17          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA    | 1:A:6:ALA:HB3   | 1        | 0.17          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:11:PHE:HE1  | 4        | 0.17          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:11:PHE:HE2  | 4        | 0.17          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:11:PHE:HE1  | 4        | 0.17          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:11:PHE:HE2  | 4        | 0.17          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:11:PHE:HE1  | 8        | 0.17          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB2  | 1:A:11:PHE:HE2  | 8        | 0.17          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:11:PHE:HE1  | 8        | 0.17          |
| (1,529) | 1:A:11:PHE:HB3  | 1:A:11:PHE:HE2  | 8        | 0.17          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:14:GLN:HB2  | 4        | 0.17          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:14:GLN:HB3  | 4        | 0.17          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:14:GLN:HB2  | 8        | 0.17          |
| (1,521) | 1:A:10:ASP:H    | 1:A:14:GLN:HB3  | 8        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H     | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.17          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1      | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.17          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.17          |
| (1,469) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.17          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H     | 9        | 0.17          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H     | 9        | 0.17          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H     | 9        | 0.17          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H    | 9        | 0.17          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H    | 9        | 0.17          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H    | 9        | 0.17          |
| (1,15)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:3:ARG:H    | 9        | 0.17          |
| (1,15)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:3:ARG:H    | 9        | 0.17          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H    | 13       | 0.16          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H    | 13       | 0.16          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H    | 13       | 0.16          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H    | 13       | 0.16          |
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HG2 | 5        | 0.16          |
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HG3 | 5        | 0.16          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:17:LYS:H   | 1        | 0.16          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:17:LYS:H   | 1        | 0.16          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:17:LYS:H   | 5        | 0.16          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:17:LYS:H   | 5        | 0.16          |
| (1,672) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:16:LYS:H   | 15       | 0.16          |
| (1,647) | 1:A:13:LEU:HA  | 1:A:16:LYS:H   | 15       | 0.16          |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:H   | 4        | 0.16          |
| (1,640) | 1:A:13:LEU:HG  | 1:A:14:GLN:H   | 8        | 0.16          |
| (1,61)  | 1:A:2:MET:HG2  | 1:A:6:ALA:HA   | 9        | 0.16          |
| (1,61)  | 1:A:2:MET:HG3  | 1:A:6:ALA:HA   | 9        | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB1  | 3        | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB2  | 3        | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB3  | 3        | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB1  | 4        | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB2  | 4        | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB3  | 4        | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB1  | 6        | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB2  | 6        | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB3  | 6        | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB1  | 7        | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB2  | 7        | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB3  | 7        | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB1  | 8        | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB2  | 8        | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB3  | 8        | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB1  | 10       | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB2  | 10       | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB3  | 10       | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB1  | 11       | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB2  | 11       | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB3  | 11       | 0.16          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB1  | 12       | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB2  | 12       | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB3  | 12       | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB1  | 16       | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB2  | 16       | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB3  | 16       | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB1  | 18       | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB2  | 18       | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB3  | 18       | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB1  | 20       | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB2  | 20       | 0.16          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA  | 1:A:6:ALA:HB3  | 20       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 2        | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 2        | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 2        | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 2        | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 3        | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 3        | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 3        | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 3        | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 7        | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 7        | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 7        | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 7        | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 9        | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 9        | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 9        | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 9        | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 10       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 10       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 10       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 10       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 11       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 11       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 11       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 11       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 13       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 13       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 13       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 13       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 14       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 14       | 0.16          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 14       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 14       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 16       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 16       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 16       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 16       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 17       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 17       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 17       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 17       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 18       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 18       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 18       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 18       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 19       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 19       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 19       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 19       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 20       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 20       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 20       | 0.16          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 20       | 0.16          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HG2  | 12       | 0.16          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:9:ARG:HG3  | 12       | 0.16          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2  | 4        | 0.16          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3  | 4        | 0.16          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2  | 4        | 0.16          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3  | 4        | 0.16          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2  | 8        | 0.16          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3  | 8        | 0.16          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2  | 8        | 0.16          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3  | 8        | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 1        | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 1        | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 3        | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 3        | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 6        | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 6        | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 7        | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 7        | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2  | 9        | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3  | 9        | 0.16          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.16          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.16          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD1 | 2        | 0.16          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD2 | 2        | 0.16          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD1 | 5        | 0.16          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD2 | 5        | 0.16          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD1 | 13       | 0.16          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD2 | 13       | 0.16          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H   | 8        | 0.16          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H   | 8        | 0.16          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H   | 8        | 0.16          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H   | 8        | 0.16          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H   | 8        | 0.16          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H   | 8        | 0.16          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:4:LEU:H   | 14       | 0.15          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD3  | 1:A:4:LEU:H   | 14       | 0.15          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H   | 2        | 0.15          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H   | 2        | 0.15          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H   | 4        | 0.15          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H   | 4        | 0.15          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H   | 6        | 0.15          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H   | 6        | 0.15          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H   | 7        | 0.15          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H   | 7        | 0.15          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H   | 8        | 0.15          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H   | 8        | 0.15          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H   | 10       | 0.15          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H   | 10       | 0.15          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H   | 17       | 0.15          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H   | 17       | 0.15          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|--------------|----------|---------------|
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H  | 2        | 0.15          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H  | 2        | 0.15          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H  | 4        | 0.15          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H  | 4        | 0.15          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H  | 6        | 0.15          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H  | 6        | 0.15          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H  | 7        | 0.15          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H  | 7        | 0.15          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H  | 8        | 0.15          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H  | 8        | 0.15          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H  | 10       | 0.15          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H  | 10       | 0.15          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H  | 17       | 0.15          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H  | 17       | 0.15          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:17:LYS:H | 6        | 0.15          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:17:LYS:H | 6        | 0.15          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:17:LYS:H | 7        | 0.15          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:17:LYS:H | 7        | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H | 1        | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H | 1        | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H | 2        | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H | 2        | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H | 3        | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H | 3        | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H | 6        | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H | 6        | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H | 7        | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H | 7        | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H | 9        | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H | 9        | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H | 10       | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H | 10       | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H | 11       | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H | 11       | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H | 12       | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H | 12       | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H | 13       | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H | 13       | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H | 14       | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H | 14       | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H | 16       | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H | 16       | 0.15          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H   | 17       | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H   | 17       | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H   | 18       | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H   | 18       | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H   | 19       | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H   | 19       | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H   | 20       | 0.15          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H   | 20       | 0.15          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H   | 1:A:14:GLN:HG2 | 11       | 0.15          |
| (1,641) | 1:A:13:LEU:H   | 1:A:14:GLN:HG3 | 11       | 0.15          |
| (1,553) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HG2 | 15       | 0.15          |
| (1,553) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:14:GLN:HG3 | 15       | 0.15          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB1  | 15       | 0.15          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB2  | 15       | 0.15          |
| (1,54)  | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:6:ALA:HB3  | 15       | 0.15          |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:H   | 4        | 0.15          |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:H   | 8        | 0.15          |
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HG  | 15       | 0.15          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:11:PHE:HA  | 4        | 0.15          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:11:PHE:HA  | 8        | 0.15          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:11:PHE:H   | 4        | 0.15          |
| (1,407) | 1:A:8:PHE:HZ   | 1:A:11:PHE:H   | 8        | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HB2 | 1        | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HB3 | 1        | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HB2 | 1        | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HB3 | 1        | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HB2 | 5        | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HB3 | 5        | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HB2 | 5        | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HB3 | 5        | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HB2 | 6        | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HB3 | 6        | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HB2 | 12       | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HB3 | 12       | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HB2 | 12       | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HB3 | 12       | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HB2 | 15       | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE1  | 1:A:11:PHE:HB3 | 15       | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HB2 | 15       | 0.15          |
| (1,331) | 1:A:7:PHE:HE2  | 1:A:11:PHE:HB3 | 15       | 0.15          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG2 | 1        | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG3 | 1        | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG2 | 2        | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG3 | 2        | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG2 | 3        | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG3 | 3        | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG2 | 5        | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG3 | 5        | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG2 | 6        | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG3 | 6        | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG2 | 7        | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG3 | 7        | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG2 | 9        | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG3 | 9        | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG2 | 10       | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG3 | 10       | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG2 | 11       | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG3 | 11       | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG2 | 13       | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG3 | 13       | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG2 | 14       | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG3 | 14       | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG2 | 15       | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG3 | 15       | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG2 | 16       | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG3 | 16       | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG2 | 17       | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG3 | 17       | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG2 | 18       | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG3 | 18       | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG2 | 19       | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG3 | 19       | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG2 | 20       | 0.15          |
| (1,315) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:9:ARG:HG3 | 20       | 0.15          |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:8:PHE:HZ  | 1        | 0.15          |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:8:PHE:HZ  | 2        | 0.15          |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:8:PHE:HZ  | 3        | 0.15          |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:8:PHE:HZ  | 5        | 0.15          |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:8:PHE:HZ  | 6        | 0.15          |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:8:PHE:HZ  | 7        | 0.15          |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:8:PHE:HZ  | 9        | 0.15          |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ | 1:A:8:PHE:HZ  | 10       | 0.15          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HZ   | 11       | 0.15          |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HZ   | 12       | 0.15          |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HZ   | 13       | 0.15          |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HZ   | 14       | 0.15          |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HZ   | 15       | 0.15          |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HZ   | 16       | 0.15          |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HZ   | 17       | 0.15          |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HZ   | 18       | 0.15          |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HZ   | 19       | 0.15          |
| (1,309) | 1:A:7:PHE:HZ  | 1:A:8:PHE:HZ   | 20       | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 1        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 1        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 1        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 1        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 1        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 1        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 1        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 1        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 1        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 1        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 1        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 1        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 3        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 3        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 3        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 3        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 3        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 3        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 3        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 3        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 3        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 3        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 3        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 3        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 4        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 4        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 4        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 4        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 4        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 4        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 4        | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 4        | 0.15          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 4        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 4        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 4        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 4        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 6        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 6        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 6        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 6        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 6        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 6        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 6        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 6        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 6        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 6        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 6        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 6        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 7        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 7        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 7        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 7        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 7        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 7        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 7        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 7        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 7        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 7        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 7        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 7        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 8        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 8        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 8        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 8        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 8        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 8        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 8        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 8        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 8        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 8        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 8        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 8        | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 10       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 10       | 0.15          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key    | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|--------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 10       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 10       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 10       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 10       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 10       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 10       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 10       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 10       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 10       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 10       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 15       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 15       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 15       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 15       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 15       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 15       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 15       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 15       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 15       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 15       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 15       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 15       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 16       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 16       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 16       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 16       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 16       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 16       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 16       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 16       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 16       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 16       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 16       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 16       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 18       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 18       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 18       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 18       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 18       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 18       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 18       | 0.15          |
| (1,30) | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 18       | 0.15          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 18       | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 18       | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 18       | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 18       | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 20       | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 20       | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 20       | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 20       | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 20       | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 20       | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 20       | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 20       | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 20       | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 20       | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 20       | 0.15          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 20       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2  | 1        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3  | 1        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2  | 1        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3  | 1        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2  | 2        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3  | 2        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2  | 2        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3  | 2        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2  | 3        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3  | 3        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2  | 3        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3  | 3        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2  | 5        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3  | 5        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2  | 5        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3  | 5        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2  | 6        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3  | 6        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2  | 6        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3  | 6        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2  | 7        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3  | 7        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2  | 7        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3  | 7        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2  | 9        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3  | 9        | 0.15          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.15          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.15          |
| (1,295) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD2 | 5        | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD3 | 5        | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD2 | 5        | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD3 | 5        | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD2 | 5        | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD3 | 5        | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD2 | 11       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD3 | 11       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD2 | 11       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD3 | 11       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD2 | 11       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD3 | 11       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD2 | 12       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD3 | 12       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD2 | 12       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD3 | 12       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD2 | 12       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD3 | 12       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD2 | 13       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD3 | 13       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD2 | 13       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD3 | 13       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD2 | 13       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD3 | 13       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD2 | 19       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD3 | 19       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD2 | 19       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD3 | 19       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD2 | 19       | 0.15          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD3 | 19       | 0.15          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 2        | 0.15          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 2        | 0.15          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.15          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.15          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.15          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.15          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.15          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.15          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2 | 17       | 0.15          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 17       | 0.15          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.15          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.15          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD1 | 14       | 0.15          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD2 | 14       | 0.15          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD1 | 19       | 0.15          |
| (1,203) | 1:A:4:LEU:HG   | 1:A:8:PHE:HD2 | 19       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H   | 1        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H   | 1        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H   | 1        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H   | 1        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H   | 1        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H   | 1        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H   | 3        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H   | 3        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H   | 3        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H   | 3        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H   | 3        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H   | 3        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H   | 4        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H   | 4        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H   | 4        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H   | 4        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H   | 4        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H   | 4        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H   | 6        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H   | 6        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H   | 6        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H   | 6        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H   | 6        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H   | 6        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H   | 7        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H   | 7        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H   | 7        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H   | 7        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H   | 7        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H   | 7        | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H   | 10       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H   | 10       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H   | 10       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H   | 10       | 0.15          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2      | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-------------|----------|---------------|
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H | 10       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H | 10       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H | 11       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H | 11       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H | 11       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H | 11       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H | 11       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H | 11       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H | 12       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H | 12       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H | 12       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H | 12       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H | 12       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H | 12       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H | 15       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H | 15       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H | 15       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H | 15       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H | 15       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H | 15       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H | 16       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H | 16       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H | 16       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H | 16       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H | 16       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H | 16       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H | 17       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H | 17       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H | 17       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H | 17       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H | 17       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H | 17       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H | 18       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H | 18       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H | 18       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H | 18       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H | 18       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H | 18       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H | 20       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H | 20       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H | 20       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H | 20       | 0.15          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22  | 1:A:6:ALA:H     | 20       | 0.15          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23  | 1:A:6:ALA:H     | 20       | 0.15          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H     | 1:A:5:SER:H     | 3        | 0.15          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H     | 1:A:5:SER:H     | 4        | 0.15          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H     | 1:A:5:SER:H     | 6        | 0.15          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H     | 1:A:5:SER:H     | 8        | 0.15          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H     | 1:A:5:SER:H     | 10       | 0.15          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H     | 1:A:5:SER:H     | 18       | 0.15          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB2  | 15       | 0.14          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD11 | 1:A:13:LEU:HB3  | 15       | 0.14          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB2  | 15       | 0.14          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD12 | 1:A:13:LEU:HB3  | 15       | 0.14          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB2  | 15       | 0.14          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HD13 | 1:A:13:LEU:HB3  | 15       | 0.14          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB2  | 15       | 0.14          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG21 | 1:A:13:LEU:HB3  | 15       | 0.14          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB2  | 15       | 0.14          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG22 | 1:A:13:LEU:HB3  | 15       | 0.14          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB2  | 15       | 0.14          |
| (2,31)  | 1:A:12:ILE:HG23 | 1:A:13:LEU:HB3  | 15       | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG12 | 4        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG13 | 4        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG12 | 4        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG13 | 4        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG12 | 8        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG13 | 8        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG12 | 8        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG13 | 8        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.14          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.14          |
| (2,25)  | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.14          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HG12 | 4        | 0.14          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HG13 | 4        | 0.14          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.14          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HG21 | 4        | 0.14          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HG22 | 4        | 0.14          |
| (2,19)  | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:12:ILE:HG23 | 4        | 0.14          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG12 | 8        | 0.14          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG13 | 8        | 0.14          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.14          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG21 | 8        | 0.14          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG22 | 8        | 0.14          |
| (2,16)  | 1:A:9:ARG:H    | 1:A:12:ILE:HG23 | 8        | 0.14          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:4:LEU:H     | 3        | 0.14          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD3  | 1:A:4:LEU:H     | 3        | 0.14          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:4:LEU:H     | 15       | 0.14          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD3  | 1:A:4:LEU:H     | 15       | 0.14          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:4:LEU:H     | 20       | 0.14          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD3  | 1:A:4:LEU:H     | 20       | 0.14          |
| (1,9)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HB2   | 9        | 0.14          |
| (1,9)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HB3   | 9        | 0.14          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H     | 1        | 0.14          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H     | 1        | 0.14          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H     | 12       | 0.14          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H     | 12       | 0.14          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H     | 16       | 0.14          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H     | 16       | 0.14          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H     | 18       | 0.14          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H     | 18       | 0.14          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H     | 1        | 0.14          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H     | 1        | 0.14          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H     | 12       | 0.14          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H     | 12       | 0.14          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H     | 16       | 0.14          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H     | 16       | 0.14          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H     | 18       | 0.14          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H     | 18       | 0.14          |
| (1,8)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HB2   | 9        | 0.14          |
| (1,8)   | 1:A:2:MET:HA   | 1:A:3:ARG:HB3   | 9        | 0.14          |
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HG2  | 7        | 0.14          |
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA  | 1:A:17:LYS:HG3  | 7        | 0.14          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HG2 | 11       | 0.14          |
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HG3 | 11       | 0.14          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:17:LYS:H   | 2        | 0.14          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:17:LYS:H   | 2        | 0.14          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:17:LYS:H   | 3        | 0.14          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:17:LYS:H   | 3        | 0.14          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:17:LYS:H   | 10       | 0.14          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:17:LYS:H   | 10       | 0.14          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:17:LYS:H   | 14       | 0.14          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:17:LYS:H   | 14       | 0.14          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:17:LYS:H   | 16       | 0.14          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:17:LYS:H   | 16       | 0.14          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:17:LYS:H   | 17       | 0.14          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:17:LYS:H   | 17       | 0.14          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:17:LYS:H   | 18       | 0.14          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:17:LYS:H   | 18       | 0.14          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2  | 1:A:17:LYS:H   | 20       | 0.14          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3  | 1:A:17:LYS:H   | 20       | 0.14          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD2  | 1:A:15:ARG:H   | 5        | 0.14          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD3  | 1:A:15:ARG:H   | 5        | 0.14          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 11       | 0.14          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 11       | 0.14          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 11       | 0.14          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 11       | 0.14          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 11       | 0.14          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 11       | 0.14          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 11       | 0.14          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 11       | 0.14          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 11       | 0.14          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 11       | 0.14          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 11       | 0.14          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 11       | 0.14          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:13:LEU:HB2 | 5        | 0.14          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:13:LEU:HB3 | 5        | 0.14          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:13:LEU:HB2 | 5        | 0.14          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:13:LEU:HB3 | 5        | 0.14          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:13:LEU:HB2 | 11       | 0.14          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1  | 1:A:13:LEU:HB3 | 11       | 0.14          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:13:LEU:HB2 | 11       | 0.14          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2  | 1:A:13:LEU:HB3 | 11       | 0.14          |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:H   | 1        | 0.14          |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA   | 1:A:12:ILE:H   | 2        | 0.14          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:H   | 3        | 0.14          |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:H   | 5        | 0.14          |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:H   | 6        | 0.14          |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:H   | 7        | 0.14          |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:H   | 9        | 0.14          |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:H   | 10       | 0.14          |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:H   | 11       | 0.14          |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:H   | 13       | 0.14          |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:H   | 14       | 0.14          |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:H   | 16       | 0.14          |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:H   | 17       | 0.14          |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:H   | 18       | 0.14          |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:H   | 19       | 0.14          |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA | 1:A:12:ILE:H   | 20       | 0.14          |
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HG  | 2        | 0.14          |
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HG  | 11       | 0.14          |
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HG  | 12       | 0.14          |
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HG  | 17       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 1        | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 1        | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 2        | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 2        | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 3        | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 3        | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 5        | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 5        | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 6        | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 6        | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 7        | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 7        | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 8        | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 8        | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 9        | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 9        | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 10       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 10       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 11       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 11       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 12       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 12       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 13       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 13       | 0.14          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 14       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 14       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 15       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 15       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 16       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 16       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 17       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 17       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 18       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 18       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 19       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 19       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 20       | 0.14          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 20       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 11       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 11       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 11       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 11       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 11       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 11       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 11       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 11       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 11       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 11       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 11       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 11       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11 | 12       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12 | 12       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13 | 12       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21 | 12       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22 | 12       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23 | 12       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11 | 12       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12 | 12       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13 | 12       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD21 | 12       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD22 | 12       | 0.14          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD23 | 12       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD2  | 1        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD3  | 1        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD2  | 1        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD3  | 1        | 0.14          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD2 | 1        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD3 | 1        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD2 | 2        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD3 | 2        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD2 | 2        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD3 | 2        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD2 | 2        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD3 | 2        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD2 | 6        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD3 | 6        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD2 | 6        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD3 | 6        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD2 | 6        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD3 | 6        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD2 | 7        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD3 | 7        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD2 | 7        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD3 | 7        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD2 | 7        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD3 | 7        | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD2 | 14       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD3 | 14       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD2 | 14       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD3 | 14       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD2 | 14       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD3 | 14       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD2 | 15       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD3 | 15       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD2 | 15       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD3 | 15       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD2 | 15       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD3 | 15       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD2 | 16       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD3 | 16       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD2 | 16       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD3 | 16       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD2 | 16       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD3 | 16       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD2 | 17       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD3 | 17       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD2 | 17       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD3 | 17       | 0.14          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD2 | 17       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD3 | 17       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD2 | 20       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD3 | 20       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD2 | 20       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD3 | 20       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD2 | 20       | 0.14          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD3 | 20       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 1        | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 1        | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 2        | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 2        | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 3        | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 3        | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 6        | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 6        | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 7        | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 7        | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 10       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 10       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 11       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 11       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 12       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 12       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 13       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 13       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 14       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 14       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 15       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 15       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 16       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 16       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 18       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 18       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 20       | 0.14          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 20       | 0.14          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.14          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:HB3 | 4        | 0.14          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB2 | 8        | 0.14          |
| (1,241) | 1:A:5:SER:H    | 1:A:8:PHE:HB3 | 8        | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H   | 2        | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H   | 2        | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H   | 2        | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H   | 2        | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H   | 2        | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H   | 2        | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H   | 5        | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H   | 5        | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H   | 5        | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H   | 5        | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H   | 5        | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H   | 5        | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H   | 13       | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H   | 13       | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H   | 13       | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H   | 13       | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H   | 13       | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H   | 13       | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H   | 14       | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H   | 14       | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H   | 14       | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H   | 14       | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H   | 14       | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H   | 14       | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:6:ALA:H   | 19       | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:6:ALA:H   | 19       | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:6:ALA:H   | 19       | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:6:ALA:H   | 19       | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:6:ALA:H   | 19       | 0.14          |
| (1,162) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:6:ALA:H   | 19       | 0.14          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:5:SER:H   | 1        | 0.14          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:5:SER:H   | 2        | 0.14          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:5:SER:H   | 7        | 0.14          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:5:SER:H   | 9        | 0.14          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:5:SER:H   | 11       | 0.14          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:5:SER:H   | 12       | 0.14          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:5:SER:H   | 13       | 0.14          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:5:SER:H   | 15       | 0.14          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:5:SER:H   | 16       | 0.14          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H    | 1:A:5:SER:H   | 20       | 0.14          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:4:LEU:H    | 5        | 0.13          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD3  | 1:A:4:LEU:H    | 5        | 0.13          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:4:LEU:H    | 11       | 0.13          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD3  | 1:A:4:LEU:H    | 11       | 0.13          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:4:LEU:H    | 13       | 0.13          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD3  | 1:A:4:LEU:H    | 13       | 0.13          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD2  | 1:A:4:LEU:H    | 17       | 0.13          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD3  | 1:A:4:LEU:H    | 17       | 0.13          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H    | 19       | 0.13          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H    | 19       | 0.13          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG2  | 1:A:3:ARG:H    | 19       | 0.13          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG3  | 1:A:3:ARG:H    | 19       | 0.13          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:17:LYS:H   | 9        | 0.13          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:17:LYS:H   | 9        | 0.13          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:17:LYS:H   | 13       | 0.13          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:17:LYS:H   | 13       | 0.13          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG2 | 1:A:17:LYS:H   | 15       | 0.13          |
| (1,720) | 1:A:15:ARG:HG3 | 1:A:17:LYS:H   | 15       | 0.13          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD2 | 1:A:15:ARG:H   | 15       | 0.13          |
| (1,702) | 1:A:15:ARG:HD3 | 1:A:15:ARG:H   | 15       | 0.13          |
| (1,676) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:17:LYS:HG2 | 4        | 0.13          |
| (1,676) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:17:LYS:HG3 | 4        | 0.13          |
| (1,676) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:17:LYS:HG2 | 8        | 0.13          |
| (1,676) | 1:A:14:GLN:HA  | 1:A:17:LYS:HG3 | 8        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB2 | 1        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB3 | 1        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB2 | 1        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 1        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB2 | 2        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB3 | 2        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB2 | 2        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 2        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB2 | 3        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB3 | 3        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB2 | 3        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 3        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB2 | 6        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB3 | 6        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB2 | 6        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 6        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB2 | 7        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB3 | 7        | 0.13          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB2 | 7        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 7        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB2 | 9        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB3 | 9        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB2 | 9        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 9        | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB2 | 10       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB3 | 10       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB2 | 10       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 10       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB2 | 12       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB3 | 12       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB2 | 12       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 12       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB2 | 13       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB3 | 13       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB2 | 13       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 13       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB2 | 14       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB3 | 14       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB2 | 14       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 14       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB2 | 16       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB3 | 16       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB2 | 16       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 16       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB2 | 17       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB3 | 17       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB2 | 17       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 17       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB2 | 18       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB3 | 18       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB2 | 18       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 18       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB2 | 20       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB3 | 20       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB2 | 20       | 0.13          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB3 | 20       | 0.13          |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:H   | 12       | 0.13          |
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HG  | 1        | 0.13          |
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HG  | 3        | 0.13          |
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HG  | 5        | 0.13          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HG  | 6        | 0.13          |
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HG  | 7        | 0.13          |
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HG  | 9        | 0.13          |
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HG  | 10       | 0.13          |
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HG  | 13       | 0.13          |
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HG  | 14       | 0.13          |
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HG  | 16       | 0.13          |
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HG  | 18       | 0.13          |
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HG  | 19       | 0.13          |
| (1,461) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HG  | 20       | 0.13          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB2 | 4        | 0.13          |
| (1,441) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:10:ASP:HB3 | 4        | 0.13          |
| (1,330) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 4        | 0.13          |
| (1,330) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 4        | 0.13          |
| (1,330) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 4        | 0.13          |
| (1,330) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 4        | 0.13          |
| (1,330) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB2 | 8        | 0.13          |
| (1,330) | 1:A:7:PHE:HE1 | 1:A:11:PHE:HB3 | 8        | 0.13          |
| (1,330) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB2 | 8        | 0.13          |
| (1,330) | 1:A:7:PHE:HE2 | 1:A:11:PHE:HB3 | 8        | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H    | 1        | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H    | 1        | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H    | 2        | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H    | 2        | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H    | 3        | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H    | 3        | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H    | 4        | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H    | 4        | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H    | 5        | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H    | 5        | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H    | 6        | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H    | 6        | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H    | 7        | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H    | 7        | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H    | 8        | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H    | 8        | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H    | 10       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H    | 10       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H    | 11       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H    | 11       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H    | 12       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H    | 12       | 0.13          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 13       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 13       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 14       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 14       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 15       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 15       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 16       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 16       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 17       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 17       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 18       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 18       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 19       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 19       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H   | 20       | 0.13          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H   | 20       | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD2 | 3        | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD3 | 3        | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD2 | 3        | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD3 | 3        | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD2 | 3        | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD3 | 3        | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD2 | 9        | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD3 | 9        | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD2 | 9        | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD3 | 9        | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD2 | 9        | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD3 | 9        | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD2 | 10       | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD3 | 10       | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD2 | 10       | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD3 | 10       | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD2 | 10       | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD3 | 10       | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD2 | 18       | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HD3 | 18       | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD2 | 18       | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HD3 | 18       | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD2 | 18       | 0.13          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HD3 | 18       | 0.13          |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:9:ARG:HE  | 5        | 0.13          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H   | 1:A:8:PHE:HB2 | 4        | 0.13          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H     | 1:A:8:PHE:HB3  | 4        | 0.13          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H     | 1:A:8:PHE:HB2  | 8        | 0.13          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H     | 1:A:8:PHE:HB3  | 8        | 0.13          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H     | 1:A:8:PHE:HB2  | 9        | 0.13          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H     | 1:A:8:PHE:HB3  | 9        | 0.13          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H     | 1:A:8:PHE:HB2  | 17       | 0.13          |
| (1,258) | 1:A:6:ALA:H     | 1:A:8:PHE:HB3  | 17       | 0.13          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H     | 1:A:8:PHE:H    | 1        | 0.13          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H     | 1:A:8:PHE:H    | 2        | 0.13          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H     | 1:A:8:PHE:H    | 4        | 0.13          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H     | 1:A:8:PHE:H    | 5        | 0.13          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H     | 1:A:8:PHE:H    | 6        | 0.13          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H     | 1:A:8:PHE:H    | 8        | 0.13          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H     | 1:A:8:PHE:H    | 9        | 0.13          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H     | 1:A:8:PHE:H    | 13       | 0.13          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H     | 1:A:8:PHE:H    | 14       | 0.13          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H     | 1:A:8:PHE:H    | 17       | 0.13          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H     | 1:A:8:PHE:H    | 18       | 0.13          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H     | 1:A:5:SER:H    | 5        | 0.13          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H     | 1:A:5:SER:H    | 14       | 0.13          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H     | 1:A:5:SER:H    | 17       | 0.13          |
| (1,161) | 1:A:4:LEU:H     | 1:A:5:SER:H    | 19       | 0.13          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD2   | 1:A:4:LEU:H    | 9        | 0.12          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD3   | 1:A:4:LEU:H    | 9        | 0.12          |
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HG2 | 6        | 0.12          |
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HG3 | 6        | 0.12          |
| (1,677) | 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:17:LYS:H   | 15       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 6        | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 6        | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 6        | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 6        | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 6        | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 6        | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 6        | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 6        | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 6        | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 6        | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 6        | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 6        | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 12       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 12       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 12       | 0.12          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 12       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 12       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 12       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 12       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 12       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 12       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 12       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 12       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 12       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 13       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 13       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 13       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 13       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 13       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 13       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 13       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 13       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 13       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 13       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 13       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 13       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 16       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 16       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 16       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 16       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 16       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 16       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 16       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 16       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 16       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 16       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 16       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 16       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 17       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 17       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 17       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 17       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 17       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 17       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 17       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 17       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 17       | 0.12          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG3  | 17       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG2  | 17       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG3  | 17       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2  | 18       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3  | 18       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2  | 18       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3  | 18       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2  | 18       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3  | 18       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG2  | 18       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG3  | 18       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG2  | 18       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG3  | 18       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG2  | 18       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG3  | 18       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2  | 20       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3  | 20       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2  | 20       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3  | 20       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2  | 20       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3  | 20       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG2  | 20       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG3  | 20       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG2  | 20       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG3  | 20       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG2  | 20       | 0.12          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG3  | 20       | 0.12          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.12          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.12          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.12          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.12          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.12          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.12          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.12          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.12          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.12          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.12          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.12          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.12          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD11 | 12       | 0.12          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD12 | 12       | 0.12          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD13 | 12       | 0.12          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:13:LEU:HD21 | 12       | 0.12          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:13:LEU:HD22 | 12       | 0.12          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:13:LEU:HD23 | 12       | 0.12          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:13:LEU:HD11 | 19       | 0.12          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:13:LEU:HD12 | 19       | 0.12          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:13:LEU:HD13 | 19       | 0.12          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:13:LEU:HD21 | 19       | 0.12          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:13:LEU:HD22 | 19       | 0.12          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H   | 1:A:13:LEU:HD23 | 19       | 0.12          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB2  | 15       | 0.12          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB3  | 15       | 0.12          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB2  | 15       | 0.12          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB3  | 15       | 0.12          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB2  | 19       | 0.12          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE1 | 1:A:13:LEU:HB3  | 19       | 0.12          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB2  | 19       | 0.12          |
| (1,550) | 1:A:11:PHE:HE2 | 1:A:13:LEU:HB3  | 19       | 0.12          |
| (1,534) | 1:A:11:PHE:HA  | 1:A:12:ILE:H    | 15       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 1        | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 1        | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 2        | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 2        | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 3        | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 3        | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 5        | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 5        | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 6        | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 6        | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 7        | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 7        | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 9        | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 9        | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 10       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 10       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 11       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 11       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 12       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 12       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 13       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 13       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 14       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 14       | 0.12          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 15       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 15       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 16       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 16       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 17       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 17       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 18       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 18       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 19       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 19       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB2  | 20       | 0.12          |
| (1,513) | 1:A:10:ASP:H   | 1:A:13:LEU:HB3  | 20       | 0.12          |
| (1,494) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 1        | 0.12          |
| (1,494) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 2        | 0.12          |
| (1,494) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 3        | 0.12          |
| (1,494) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 5        | 0.12          |
| (1,494) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 6        | 0.12          |
| (1,494) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 7        | 0.12          |
| (1,494) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 9        | 0.12          |
| (1,494) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 10       | 0.12          |
| (1,494) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 11       | 0.12          |
| (1,494) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 12       | 0.12          |
| (1,494) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 13       | 0.12          |
| (1,494) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 14       | 0.12          |
| (1,494) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 15       | 0.12          |
| (1,494) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 16       | 0.12          |
| (1,494) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 17       | 0.12          |
| (1,494) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 18       | 0.12          |
| (1,494) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 19       | 0.12          |
| (1,494) | 1:A:10:ASP:HA  | 1:A:12:ILE:HA   | 20       | 0.12          |
| (1,485) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA   | 4        | 0.12          |
| (1,485) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA   | 4        | 0.12          |
| (1,485) | 1:A:10:ASP:HB2 | 1:A:11:PHE:HA   | 8        | 0.12          |
| (1,485) | 1:A:10:ASP:HB3 | 1:A:11:PHE:HA   | 8        | 0.12          |
| (1,459) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HD11 | 4        | 0.12          |
| (1,459) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HD12 | 4        | 0.12          |
| (1,459) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HD13 | 4        | 0.12          |
| (1,459) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HD21 | 4        | 0.12          |
| (1,459) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HD22 | 4        | 0.12          |
| (1,459) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HD23 | 4        | 0.12          |
| (1,459) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HD11 | 8        | 0.12          |
| (1,459) | 1:A:9:ARG:HA   | 1:A:13:LEU:HD12 | 8        | 0.12          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,459) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HD13 | 8        | 0.12          |
| (1,459) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HD21 | 8        | 0.12          |
| (1,459) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HD22 | 8        | 0.12          |
| (1,459) | 1:A:9:ARG:HA  | 1:A:13:LEU:HD23 | 8        | 0.12          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 15       | 0.12          |
| (1,438) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:10:ASP:HA   | 3        | 0.12          |
| (1,438) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:10:ASP:HA   | 11       | 0.12          |
| (1,438) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:10:ASP:HA   | 15       | 0.12          |
| (1,438) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:10:ASP:HA   | 16       | 0.12          |
| (1,438) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:10:ASP:HA   | 18       | 0.12          |
| (1,438) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:10:ASP:HA   | 20       | 0.12          |
| (1,385) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:H     | 4        | 0.12          |
| (1,385) | 1:A:8:PHE:HA  | 1:A:9:ARG:H     | 8        | 0.12          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB2 | 1:A:8:PHE:H     | 9        | 0.12          |
| (1,289) | 1:A:7:PHE:HB3 | 1:A:8:PHE:H     | 9        | 0.12          |
| (1,265) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HE    | 4        | 0.12          |
| (1,265) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HE    | 4        | 0.12          |
| (1,265) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HE    | 4        | 0.12          |
| (1,265) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:9:ARG:HE    | 8        | 0.12          |
| (1,265) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:9:ARG:HE    | 8        | 0.12          |
| (1,265) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:9:ARG:HE    | 8        | 0.12          |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:9:ARG:HE    | 1        | 0.12          |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:9:ARG:HE    | 2        | 0.12          |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:9:ARG:HE    | 3        | 0.12          |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:9:ARG:HE    | 6        | 0.12          |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:9:ARG:HE    | 7        | 0.12          |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:9:ARG:HE    | 11       | 0.12          |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:9:ARG:HE    | 13       | 0.12          |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:9:ARG:HE    | 14       | 0.12          |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA  | 1:A:9:ARG:HE    | 17       | 0.12          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:H     | 3        | 0.12          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:H     | 7        | 0.12          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:H     | 10       | 0.12          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:H     | 11       | 0.12          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:H     | 12       | 0.12          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:H     | 15       | 0.12          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:H     | 16       | 0.12          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:H     | 19       | 0.12          |
| (1,243) | 1:A:5:SER:H   | 1:A:8:PHE:H     | 20       | 0.12          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:4:LEU:H     | 16       | 0.11          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD3 | 1:A:4:LEU:H     | 16       | 0.11          |
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD2 | 1:A:4:LEU:H     | 18       | 0.11          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,96)  | 1:A:3:ARG:HD3   | 1:A:4:LEU:H    | 18       | 0.11          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG2   | 1:A:3:ARG:H    | 3        | 0.11          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG3   | 1:A:3:ARG:H    | 3        | 0.11          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG2   | 1:A:3:ARG:H    | 11       | 0.11          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG3   | 1:A:3:ARG:H    | 11       | 0.11          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG2   | 1:A:3:ARG:H    | 15       | 0.11          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG3   | 1:A:3:ARG:H    | 15       | 0.11          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG2   | 1:A:3:ARG:H    | 20       | 0.11          |
| (1,83)  | 1:A:3:ARG:HG3   | 1:A:3:ARG:H    | 20       | 0.11          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG2   | 1:A:3:ARG:H    | 3        | 0.11          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG3   | 1:A:3:ARG:H    | 3        | 0.11          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG2   | 1:A:3:ARG:H    | 11       | 0.11          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG3   | 1:A:3:ARG:H    | 11       | 0.11          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG2   | 1:A:3:ARG:H    | 15       | 0.11          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG3   | 1:A:3:ARG:H    | 15       | 0.11          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG2   | 1:A:3:ARG:H    | 20       | 0.11          |
| (1,82)  | 1:A:3:ARG:HG3   | 1:A:3:ARG:H    | 20       | 0.11          |
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HG2 | 2        | 0.11          |
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HG3 | 2        | 0.11          |
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HG2 | 20       | 0.11          |
| (1,736) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:17:LYS:HG3 | 20       | 0.11          |
| (1,724) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:16:LYS:HG2 | 11       | 0.11          |
| (1,724) | 1:A:16:LYS:HA   | 1:A:16:LYS:HG3 | 11       | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 4        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 4        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 4        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 4        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 4        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 4        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 4        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 4        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 4        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 4        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 4        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 4        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG2 | 8        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:15:ARG:HG3 | 8        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG2 | 8        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:15:ARG:HG3 | 8        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG2 | 8        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:15:ARG:HG3 | 8        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG2 | 8        | 0.11          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:15:ARG:HG3 | 8        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG2 | 8        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:15:ARG:HG3 | 8        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG2 | 8        | 0.11          |
| (1,645) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:15:ARG:HG3 | 8        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 1        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 1        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 1        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 1        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 1        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 1        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 1        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 1        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 1        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 1        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 1        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 1        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 2        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 2        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 2        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 2        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 2        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 2        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 2        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 2        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 2        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 2        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 2        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 2        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 3        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 3        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 3        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 3        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 3        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 3        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 3        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 3        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 3        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 3        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 3        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 3        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 5        | 0.11          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 5        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 5        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 5        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 5        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 5        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 5        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 5        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 5        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 5        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 5        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 5        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 7        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 7        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 7        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 7        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 7        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 7        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 7        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 7        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 7        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 7        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 7        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 7        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 9        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 9        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 9        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 9        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 9        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 9        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 9        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG3 | 9        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG2 | 9        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG3 | 9        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG2 | 9        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG3 | 9        | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2 | 10       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3 | 10       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2 | 10       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3 | 10       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2 | 10       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3 | 10       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG2 | 10       | 0.11          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1          | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG3  | 10       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG2  | 10       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG3  | 10       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG2  | 10       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG3  | 10       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2  | 14       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3  | 14       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2  | 14       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3  | 14       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2  | 14       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3  | 14       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG2  | 14       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG3  | 14       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG2  | 14       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG3  | 14       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG2  | 14       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG3  | 14       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG2  | 19       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD11 | 1:A:14:GLN:HG3  | 19       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG2  | 19       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD12 | 1:A:14:GLN:HG3  | 19       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG2  | 19       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD13 | 1:A:14:GLN:HG3  | 19       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG2  | 19       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD21 | 1:A:14:GLN:HG3  | 19       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG2  | 19       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD22 | 1:A:14:GLN:HG3  | 19       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG2  | 19       | 0.11          |
| (1,636) | 1:A:13:LEU:HD23 | 1:A:14:GLN:HG3  | 19       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H    | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.11          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.11          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.11          |
| (1,595) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 1        | 0.11          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 1        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 1        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 1        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 1        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 1        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 2        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 2        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 2        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 2        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 2        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 2        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 3        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 3        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 3        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 3        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 3        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 3        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 5        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 5        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 5        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 5        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 5        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 5        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 6        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 6        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 6        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 6        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 6        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 6        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 7        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 7        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 7        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 7        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 7        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 7        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 9        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 9        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 9        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 9        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 9        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 9        | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 10       | 0.11          |

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1       | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 10       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 10       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 10       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 10       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 10       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 11       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 11       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 11       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 11       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 11       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 11       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 13       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 13       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 13       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 13       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 13       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 13       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 14       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 14       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 14       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 14       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 14       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 14       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 15       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 15       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 15       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 15       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 15       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 15       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 16       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 16       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 16       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 16       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 16       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 16       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 17       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD12 | 17       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD13 | 17       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD21 | 17       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD22 | 17       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD23 | 17       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H | 1:A:13:LEU:HD11 | 18       | 0.11          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2          | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H  | 1:A:13:LEU:HD12 | 18       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H  | 1:A:13:LEU:HD13 | 18       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H  | 1:A:13:LEU:HD21 | 18       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H  | 1:A:13:LEU:HD22 | 18       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H  | 1:A:13:LEU:HD23 | 18       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H  | 1:A:13:LEU:HD11 | 20       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H  | 1:A:13:LEU:HD12 | 20       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H  | 1:A:13:LEU:HD13 | 20       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H  | 1:A:13:LEU:HD21 | 20       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H  | 1:A:13:LEU:HD22 | 20       | 0.11          |
| (1,594) | 1:A:12:ILE:H  | 1:A:13:LEU:HD23 | 20       | 0.11          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 1        | 0.11          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 2        | 0.11          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 3        | 0.11          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 5        | 0.11          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 6        | 0.11          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 7        | 0.11          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 9        | 0.11          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 10       | 0.11          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 11       | 0.11          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 12       | 0.11          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 13       | 0.11          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 14       | 0.11          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 16       | 0.11          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 17       | 0.11          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 18       | 0.11          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 19       | 0.11          |
| (1,448) | 1:A:9:ARG:H   | 1:A:11:PHE:HA   | 20       | 0.11          |
| (1,438) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:10:ASP:HA   | 2        | 0.11          |
| (1,438) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:10:ASP:HA   | 6        | 0.11          |
| (1,438) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:10:ASP:HA   | 7        | 0.11          |
| (1,438) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:10:ASP:HA   | 10       | 0.11          |
| (1,438) | 1:A:9:ARG:HE  | 1:A:10:ASP:HA   | 13       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD11  | 14       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD12  | 14       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD13  | 14       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD21  | 14       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD22  | 14       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2 | 1:A:4:LEU:HD23  | 14       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD11  | 14       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD12  | 14       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3 | 1:A:4:LEU:HD13  | 14       | 0.11          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2         | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD21 | 14       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD22 | 14       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD23 | 14       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD11 | 17       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD12 | 17       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD13 | 17       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD21 | 17       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD22 | 17       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB2  | 1:A:4:LEU:HD23 | 17       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD11 | 17       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD12 | 17       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD13 | 17       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD21 | 17       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD22 | 17       | 0.11          |
| (1,30)  | 1:A:2:MET:HB3  | 1:A:4:LEU:HD23 | 17       | 0.11          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:9:ARG:HD2  | 4        | 0.11          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:9:ARG:HD3  | 4        | 0.11          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:9:ARG:HD2  | 4        | 0.11          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:9:ARG:HD3  | 4        | 0.11          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:9:ARG:HD2  | 4        | 0.11          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:9:ARG:HD3  | 4        | 0.11          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:9:ARG:HD2  | 8        | 0.11          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB1  | 1:A:9:ARG:HD3  | 8        | 0.11          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:9:ARG:HD2  | 8        | 0.11          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB2  | 1:A:9:ARG:HD3  | 8        | 0.11          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:9:ARG:HD2  | 8        | 0.11          |
| (1,264) | 1:A:6:ALA:HB3  | 1:A:9:ARG:HD3  | 8        | 0.11          |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA   | 1:A:9:ARG:HE   | 10       | 0.11          |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA   | 1:A:9:ARG:HE   | 12       | 0.11          |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA   | 1:A:9:ARG:HE   | 15       | 0.11          |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA   | 1:A:9:ARG:HE   | 16       | 0.11          |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA   | 1:A:9:ARG:HE   | 18       | 0.11          |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA   | 1:A:9:ARG:HE   | 19       | 0.11          |
| (1,262) | 1:A:6:ALA:HA   | 1:A:9:ARG:HE   | 20       | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2  | 5        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3  | 5        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2  | 5        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3  | 5        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2  | 5        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3  | 5        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2  | 5        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3  | 5        | 0.11          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.11          |
| (1,199) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HZ  | 2        | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HZ  | 2        | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HZ  | 2        | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HZ  | 2        | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HZ  | 2        | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HZ  | 2        | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HZ  | 14       | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HZ  | 14       | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HZ  | 14       | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HZ  | 14       | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HZ  | 14       | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HZ  | 14       | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HZ  | 17       | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HZ  | 17       | 0.11          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1         | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HZ  | 17       | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HZ  | 17       | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HZ  | 17       | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HZ  | 17       | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HZ  | 19       | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HZ  | 19       | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HZ  | 19       | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HZ  | 19       | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HZ  | 19       | 0.11          |
| (1,197) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HZ  | 19       | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 5        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 5        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 9        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 9        | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD11 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD12 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD13 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19       | 0.11          |
| (1,192) | 1:A:4:LEU:HD21 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19       | 0.11          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| <b>Key</b> | <b>Atom-1</b>  | <b>Atom-2</b> | <b>Model ID</b> | <b>Violation (Å)</b> |
|------------|----------------|---------------|-----------------|----------------------|
| (1,192)    | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19              | 0.11                 |
| (1,192)    | 1:A:4:LEU:HD22 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19              | 0.11                 |
| (1,192)    | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB2 | 19              | 0.11                 |
| (1,192)    | 1:A:4:LEU:HD23 | 1:A:8:PHE:HB3 | 19              | 0.11                 |

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

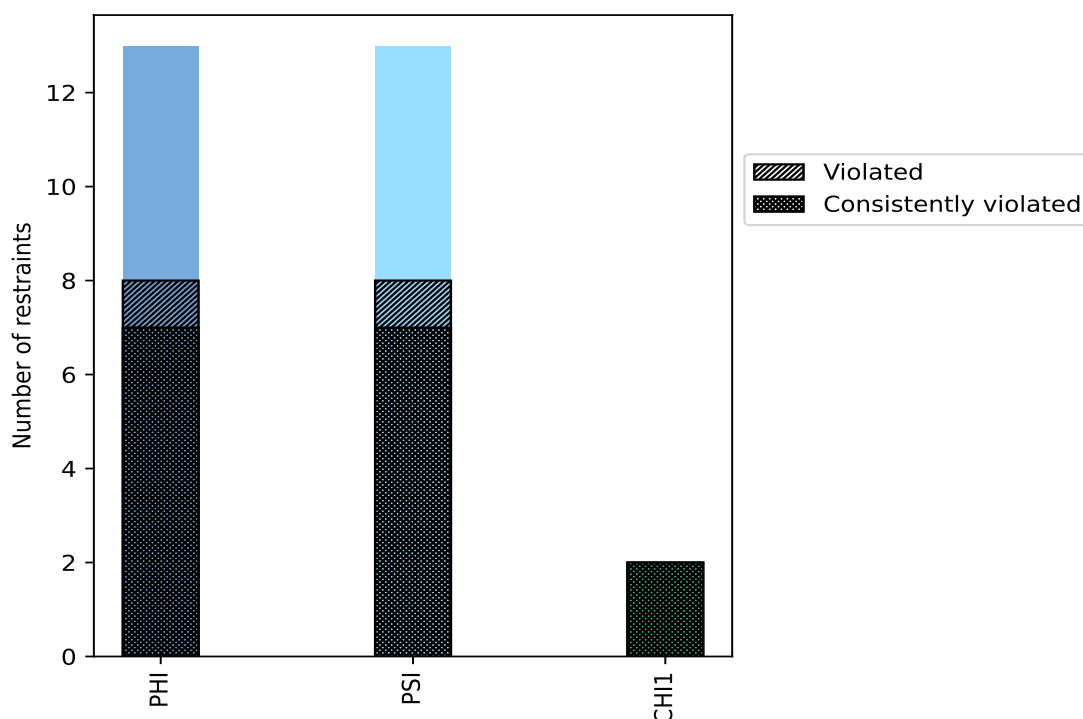
### 10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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 | % <sup>1</sup> | Violated <sup>3</sup> |                |                | Consistently Violated <sup>4</sup> |                |                |
|------------|-------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
|            |       |                | Count                 | % <sup>2</sup> | % <sup>1</sup> | Count                              | % <sup>2</sup> | % <sup>1</sup> |
| PHI        | 13    | 46.4           | 8                     | 61.5           | 28.6           | 7                                  | 53.8           | 25.0           |
| PSI        | 13    | 46.4           | 8                     | 61.5           | 28.6           | 7                                  | 53.8           | 25.0           |
| CHI1       | 2     | 7.1            | 2                     | 100.0          | 7.1            | 2                                  | 100.0          | 7.1            |
| Total      | 28    | 100.0          | 18                    | 64.3           | 64.3           | 16                                 | 57.1           | 57.1           |

<sup>1</sup> percentage calculated with respect to total number of dihedral-angle restraints, <sup>2</sup> percentage calculated with respect to number of restraints in a particular dihedral-angle type, <sup>3</sup> violated in at least one model, <sup>4</sup> 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

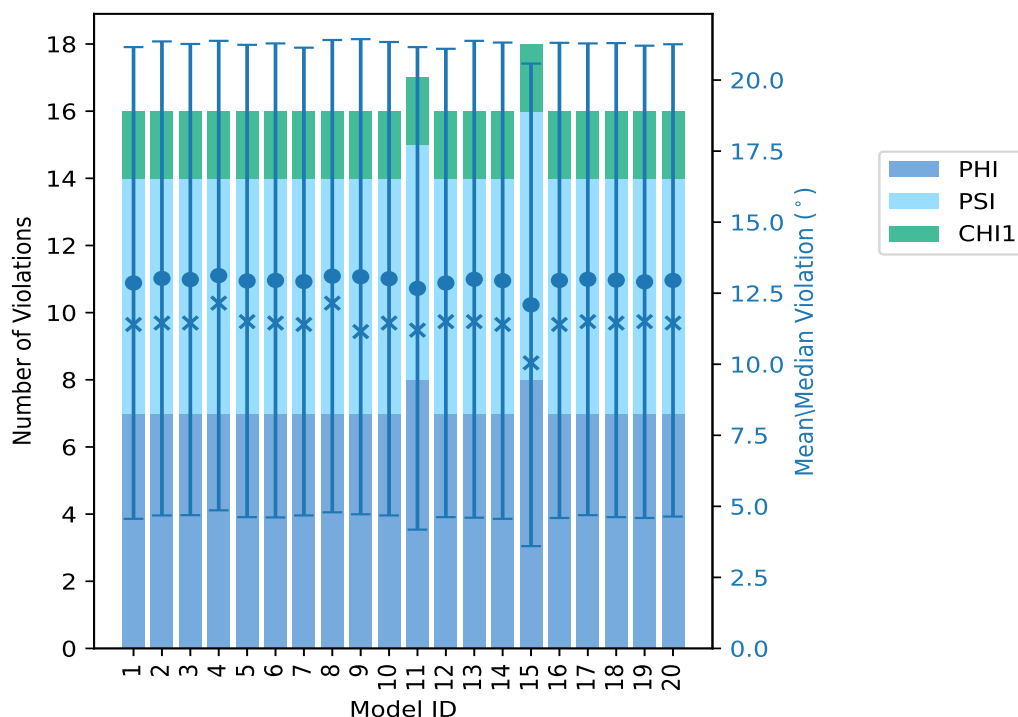
## 10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model [i](#)

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 | CHI1 | Total |          |         |        |            |
| 1        | 7                    | 7   | 2    | 16    | 12.86    | 29.1    | 8.3    | 11.4       |
| 2        | 7                    | 7   | 2    | 16    | 13.02    | 29.2    | 8.34   | 11.45      |
| 3        | 7                    | 7   | 2    | 16    | 12.98    | 29.0    | 8.29   | 11.45      |
| 4        | 7                    | 7   | 2    | 16    | 13.12    | 28.8    | 8.26   | 12.15      |
| 5        | 7                    | 7   | 2    | 16    | 12.93    | 29.2    | 8.31   | 11.5       |
| 6        | 7                    | 7   | 2    | 16    | 12.95    | 29.1    | 8.34   | 11.45      |
| 7        | 7                    | 7   | 2    | 16    | 12.91    | 29.0    | 8.23   | 11.4       |
| 8        | 7                    | 7   | 2    | 16    | 13.1     | 28.9    | 8.31   | 12.15      |
| 9        | 7                    | 7   | 2    | 16    | 13.08    | 29.1    | 8.36   | 11.15      |
| 10       | 7                    | 7   | 2    | 16    | 13.01    | 29.1    | 8.33   | 11.45      |
| 11       | 8                    | 7   | 2    | 17    | 12.67    | 29.1    | 8.49   | 11.2       |
| 12       | 7                    | 7   | 2    | 16    | 12.86    | 29.0    | 8.24   | 11.5       |
| 13       | 7                    | 7   | 2    | 16    | 12.99    | 29.1    | 8.39   | 11.5       |
| 14       | 7                    | 7   | 2    | 16    | 12.94    | 29.1    | 8.38   | 11.4       |
| 15       | 8                    | 8   | 2    | 18    | 12.09    | 28.7    | 8.49   | 10.05      |
| 16       | 7                    | 7   | 2    | 16    | 12.95    | 29.1    | 8.36   | 11.4       |
| 17       | 7                    | 7   | 2    | 16    | 12.99    | 29.1    | 8.3    | 11.5       |
| 18       | 7                    | 7   | 2    | 16    | 12.96    | 29.1    | 8.34   | 11.45      |
| 19       | 7                    | 7   | 2    | 16    | 12.9     | 29.1    | 8.31   | 11.5       |
| 20       | 7                    | 7   | 2    | 16    | 12.95    | 29.1    | 8.31   | 11.45      |



### 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 | CHI1 | Total | Count <sup>1</sup>       | %    |
| 0                             | 1   | 0    | 1     | 1                        | 5.0  |
| 1                             | 0   | 0    | 1     | 2                        | 10.0 |
| 0                             | 0   | 0    | 0     | 3                        | 15.0 |
| 0                             | 0   | 0    | 0     | 4                        | 20.0 |
| 0                             | 0   | 0    | 0     | 5                        | 25.0 |
| 0                             | 0   | 0    | 0     | 6                        | 30.0 |
| 0                             | 0   | 0    | 0     | 7                        | 35.0 |
| 0                             | 0   | 0    | 0     | 8                        | 40.0 |
| 0                             | 0   | 0    | 0     | 9                        | 45.0 |
| 0                             | 0   | 0    | 0     | 10                       | 50.0 |
| 0                             | 0   | 0    | 0     | 11                       | 55.0 |

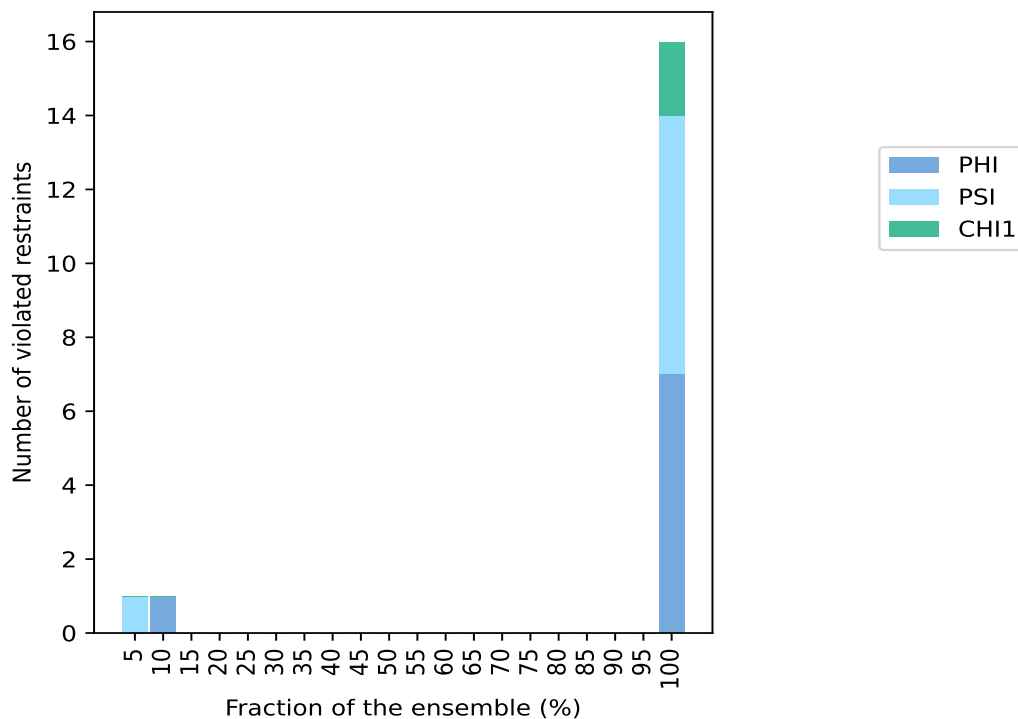
*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Number of violated restraints |     |      |       | Fraction of the ensemble |       |
|-------------------------------|-----|------|-------|--------------------------|-------|
| PHI                           | PSI | CHI1 | Total | Count <sup>1</sup>       | %     |
| 0                             | 0   | 0    | 0     | 12                       | 60.0  |
| 0                             | 0   | 0    | 0     | 13                       | 65.0  |
| 0                             | 0   | 0    | 0     | 14                       | 70.0  |
| 0                             | 0   | 0    | 0     | 15                       | 75.0  |
| 0                             | 0   | 0    | 0     | 16                       | 80.0  |
| 0                             | 0   | 0    | 0     | 17                       | 85.0  |
| 0                             | 0   | 0    | 0     | 18                       | 90.0  |
| 0                             | 0   | 0    | 0     | 19                       | 95.0  |
| 7                             | 7   | 2    | 16    | 20                       | 100.0 |

<sup>1</sup> Number of models with violations

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

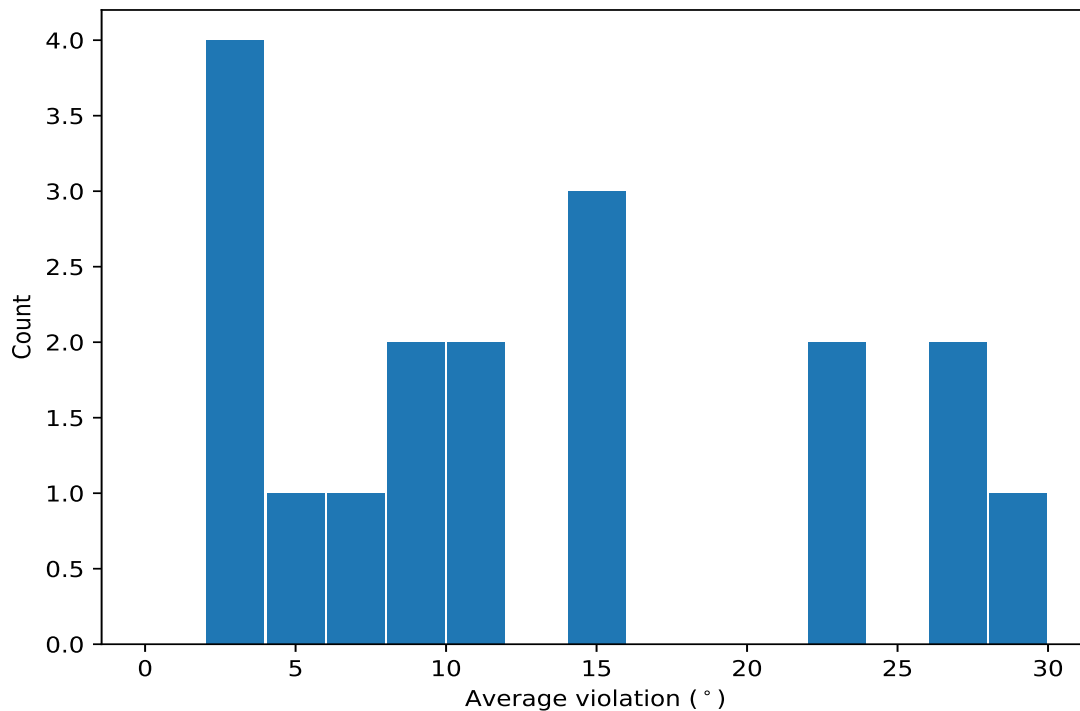


## 10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble [i](#)

### 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.

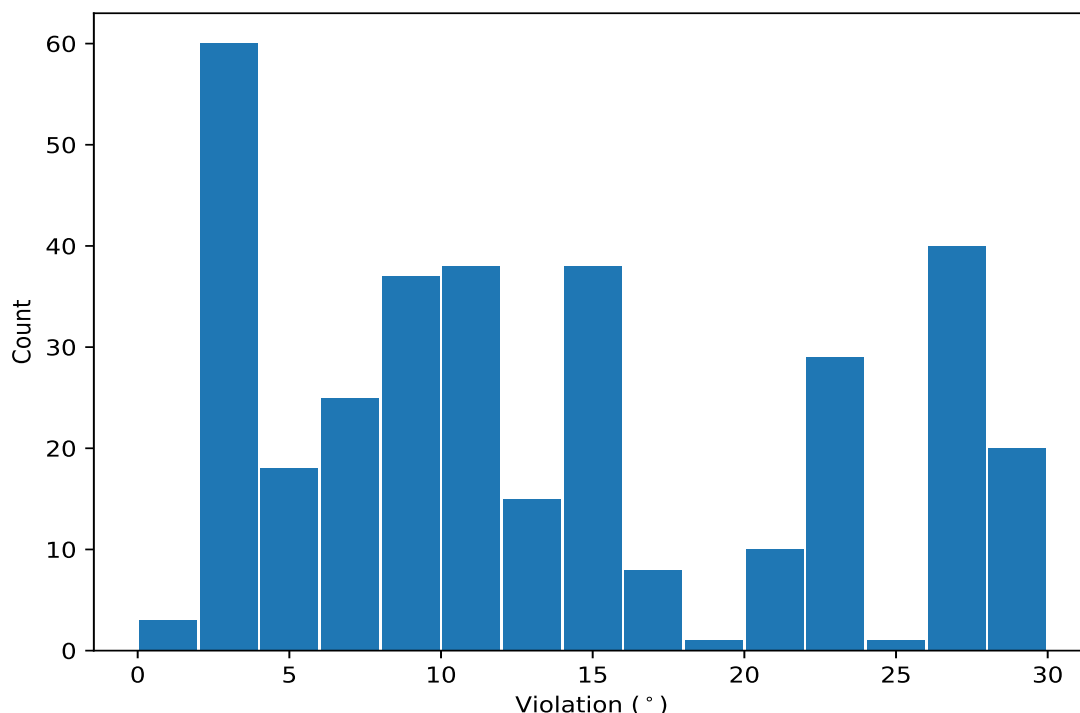
| Key    | Atom-1       | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean  | SD <sup>2</sup> | Median |
|--------|--------------|---------------|---------------|---------------|---------------------|-------|-----------------|--------|
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C  | 1:A:9:ARG:N   | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 20                  | 29.05 | 0.12            | 29.1   |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB  | 1:A:8:PHE:CG  | 20                  | 27.64 | 0.16            | 27.7   |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB  | 1:A:8:PHE:CG  | 20                  | 27.64 | 0.16            | 27.7   |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C  | 1:A:17:LYS:N  | 20                  | 22.28 | 0.64            | 22.45  |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N  | 20                  | 22.16 | 0.22            | 22.1   |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N   | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C   | 20                  | 15.85 | 0.2             | 15.85  |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N   | 20                  | 15.57 | 0.28            | 15.4   |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N  | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C  | 20                  | 14.46 | 1.34            | 13.9   |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N  | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 20                  | 11.94 | 0.43            | 11.8   |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N   | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C   | 20                  | 11.08 | 0.16            | 11.1   |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N   | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C   | 20                  | 8.86  | 0.18            | 8.9    |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N   | 20                  | 8.05  | 0.1             | 8.1    |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N  | 20                  | 6.54  | 0.54            | 6.4    |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C  | 20                  | 5.9   | 0.24            | 5.9    |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 20                  | 3.29  | 0.2             | 3.3    |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 20                  | 2.8   | 0.21            | 2.9    |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 20                  | 2.63  | 0.36            | 2.7    |
| (1,21) | 1:A:13:LEU:C | 1:A:14:GLN:N  | 1:A:14:GLN:CA | 1:A:14:GLN:C  | 2                   | 2.05  | 0.35            | 2.05   |

<sup>1</sup> Number of violated models, <sup>2</sup>Standard 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 (°) |
|--------|-------------|-------------|--------------|-------------|----------|---------------|
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:ARG:N | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C | 2        | 29.2          |
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:ARG:N | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C | 5        | 29.2          |
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:ARG:N | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C | 1        | 29.1          |
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:ARG:N | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C | 6        | 29.1          |
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:ARG:N | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C | 9        | 29.1          |
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:ARG:N | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C | 10       | 29.1          |
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:ARG:N | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C | 11       | 29.1          |
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:ARG:N | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C | 13       | 29.1          |
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:ARG:N | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C | 14       | 29.1          |
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:ARG:N | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C | 16       | 29.1          |
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:ARG:N | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C | 17       | 29.1          |
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:ARG:N | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C | 18       | 29.1          |
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:ARG:N | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C | 19       | 29.1          |
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C | 1:A:9:ARG:N | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C | 20       | 29.1          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key    | Atom-1       | Atom-2        | Atom-3       | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C  | 1:A:9:ARG:N   | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C  | 3        | 29.0          |
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C  | 1:A:9:ARG:N   | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C  | 7        | 29.0          |
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C  | 1:A:9:ARG:N   | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C  | 12       | 29.0          |
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C  | 1:A:9:ARG:N   | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C  | 8        | 28.9          |
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C  | 1:A:9:ARG:N   | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C  | 4        | 28.8          |
| (1,11) | 1:A:8:PHE:C  | 1:A:9:ARG:N   | 1:A:9:ARG:CA | 1:A:9:ARG:C  | 15       | 28.7          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 9        | 27.8          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 9        | 27.8          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 12       | 27.8          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 12       | 27.8          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 13       | 27.8          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 13       | 27.8          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 14       | 27.8          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 14       | 27.8          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 1        | 27.7          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 1        | 27.7          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 2        | 27.7          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 2        | 27.7          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 5        | 27.7          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 5        | 27.7          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 6        | 27.7          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 6        | 27.7          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 11       | 27.7          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 11       | 27.7          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 17       | 27.7          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 17       | 27.7          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 19       | 27.7          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 19       | 27.7          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 3        | 27.6          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 3        | 27.6          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 7        | 27.6          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 7        | 27.6          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 10       | 27.6          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 10       | 27.6          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 15       | 27.6          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 15       | 27.6          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 16       | 27.6          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 16       | 27.6          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 18       | 27.6          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 18       | 27.6          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 20       | 27.6          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 20       | 27.6          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 4        | 27.2          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 4        | 27.2          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 8        | 27.2          |
| (1,27) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:CB | 1:A:8:PHE:CG | 8        | 27.2          |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 1:A:17:LYS:N | 15       | 24.0          |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 1:A:17:LYS:N | 9        | 22.8          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N | 4        | 22.8          |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 1:A:17:LYS:N | 3        | 22.7          |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 1:A:17:LYS:N | 10       | 22.7          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key    | Atom-1       | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C  | 1:A:17:LYS:N | 13       | 22.7          |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C  | 1:A:17:LYS:N | 18       | 22.7          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N | 8        | 22.7          |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C  | 1:A:17:LYS:N | 2        | 22.6          |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C  | 1:A:17:LYS:N | 16       | 22.6          |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C  | 1:A:17:LYS:N | 14       | 22.5          |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C  | 1:A:17:LYS:N | 17       | 22.5          |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C  | 1:A:17:LYS:N | 6        | 22.4          |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C  | 1:A:17:LYS:N | 20       | 22.4          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N | 5        | 22.2          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N | 10       | 22.2          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N | 11       | 22.2          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N | 14       | 22.2          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N | 16       | 22.2          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N | 1        | 22.1          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N | 2        | 22.1          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N | 3        | 22.1          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N | 6        | 22.1          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N | 7        | 22.1          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N | 9        | 22.1          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N | 12       | 22.1          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N | 13       | 22.1          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N | 18       | 22.1          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N | 19       | 22.1          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N | 20       | 22.0          |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C  | 1:A:17:LYS:N | 8        | 21.9          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N | 17       | 21.9          |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C  | 1:A:17:LYS:N | 7        | 21.8          |
| (1,12) | 1:A:9:ARG:N  | 1:A:9:ARG:CA  | 1:A:9:ARG:C   | 1:A:10:ASP:N | 15       | 21.8          |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C  | 1:A:17:LYS:N | 4        | 21.7          |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C  | 1:A:17:LYS:N | 5        | 21.7          |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C  | 1:A:17:LYS:N | 19       | 21.7          |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C  | 1:A:17:LYS:N | 1        | 21.5          |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C  | 1:A:17:LYS:N | 12       | 21.4          |
| (1,26) | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C  | 1:A:17:LYS:N | 11       | 21.2          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N  | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 11       | 19.3          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N  | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 15       | 16.4          |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N   | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 9        | 16.4          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 17       | 16.1          |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N   | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 10       | 16.1          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 9        | 16.0          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 13       | 16.0          |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N   | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 6        | 16.0          |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N   | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 16       | 16.0          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 2        | 15.9          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 5        | 15.9          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 19       | 15.9          |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N   | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 3        | 15.9          |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N   | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 4        | 15.9          |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N   | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 7        | 15.9          |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N   | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 15       | 15.9          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key    | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3        | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|--------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N  | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 18       | 15.9          |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N  | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 20       | 15.9          |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N  | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 1        | 15.8          |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N  | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 2        | 15.8          |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N  | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 8        | 15.8          |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N  | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 11       | 15.8          |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N  | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 13       | 15.8          |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N  | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 19       | 15.8          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 14       | 15.7          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 4        | 15.7          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 8        | 15.7          |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N  | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 12       | 15.7          |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N  | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 14       | 15.7          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 4        | 15.5          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 8        | 15.5          |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N  | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 5        | 15.5          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 1        | 15.4          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 6        | 15.4          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 10       | 15.4          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 12       | 15.4          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 16       | 15.4          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 20       | 15.4          |
| (1,1)  | 1:A:3:ARG:C  | 1:A:4:LEU:N  | 1:A:4:LEU:CA  | 1:A:4:LEU:C  | 17       | 15.4          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 3        | 15.3          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 7        | 15.3          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 11       | 15.3          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 15       | 15.3          |
| (1,4)  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA | 1:A:5:SER:C   | 1:A:6:ALA:N  | 18       | 15.3          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 2        | 14.1          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 1        | 14.0          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 18       | 14.0          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 3        | 13.9          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 5        | 13.9          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 6        | 13.9          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 9        | 13.9          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 10       | 13.9          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 13       | 13.9          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 14       | 13.9          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 17       | 13.9          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 20       | 13.9          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 7        | 13.8          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 16       | 13.8          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 19       | 13.8          |
| (1,25) | 1:A:15:ARG:C | 1:A:16:LYS:N | 1:A:16:LYS:CA | 1:A:16:LYS:C | 12       | 13.6          |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 4        | 13.2          |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 8        | 13.2          |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 12       | 11.9          |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 18       | 11.9          |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 19       | 11.9          |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 20       | 11.9          |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 1        | 11.8          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key    | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3        | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|--------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 3        | 11.8          |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 6        | 11.8          |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 7        | 11.8          |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 9        | 11.8          |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 10       | 11.8          |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 13       | 11.8          |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 14       | 11.8          |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 15       | 11.8          |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 16       | 11.8          |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 17       | 11.8          |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 2        | 11.7          |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 5        | 11.7          |
| (1,15) | 1:A:10:ASP:C | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C | 11       | 11.5          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 5        | 11.3          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 2        | 11.2          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 11       | 11.2          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 13       | 11.2          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 15       | 11.2          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 17       | 11.2          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 3        | 11.1          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 4        | 11.1          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 6        | 11.1          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 8        | 11.1          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 10       | 11.1          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 12       | 11.1          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 19       | 11.1          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 1        | 11.0          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 7        | 11.0          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 14       | 11.0          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 16       | 11.0          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 18       | 11.0          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 20       | 11.0          |
| (1,3)  | 1:A:4:LEU:C  | 1:A:5:SER:N  | 1:A:5:SER:CA  | 1:A:5:SER:C  | 9        | 10.5          |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N  | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 9        | 9.3           |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N  | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 11       | 9.1           |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N  | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 4        | 9.0           |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N  | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 3        | 8.9           |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N  | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 5        | 8.9           |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N  | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 6        | 8.9           |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N  | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 7        | 8.9           |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N  | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 8        | 8.9           |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N  | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 10       | 8.9           |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N  | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 15       | 8.9           |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N  | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 16       | 8.9           |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N  | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 17       | 8.9           |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N  | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 20       | 8.9           |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N  | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 1        | 8.8           |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N  | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 12       | 8.8           |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N  | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 18       | 8.8           |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N  | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 2        | 8.6           |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N  | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 13       | 8.6           |

Continued on next page...



Continued from previous page...

| Key    | Atom-1       | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N   | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 19       | 8.6           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 11       | 8.6           |
| (1,5)  | 1:A:5:SER:C  | 1:A:6:ALA:N   | 1:A:6:ALA:CA  | 1:A:6:ALA:C  | 14       | 8.5           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 9        | 8.3           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 17       | 8.2           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 2        | 8.1           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 4        | 8.1           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 5        | 8.1           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 8        | 8.1           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 10       | 8.1           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 14       | 8.1           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 16       | 8.1           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 18       | 8.1           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 20       | 8.1           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 3        | 8.0           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 6        | 8.0           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 7        | 8.0           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 11       | 8.0           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 13       | 8.0           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 1        | 7.9           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 12       | 7.9           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 15       | 7.9           |
| (1,10) | 1:A:8:PHE:N  | 1:A:8:PHE:CA  | 1:A:8:PHE:C   | 1:A:9:ARG:N  | 19       | 7.9           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 15       | 7.4           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 9        | 6.6           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 2        | 6.5           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 3        | 6.5           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 20       | 6.5           |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 4        | 6.5           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 5        | 6.4           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 6        | 6.4           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 7        | 6.4           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 10       | 6.4           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 13       | 6.4           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 14       | 6.4           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 16       | 6.4           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 17       | 6.4           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 18       | 6.4           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 19       | 6.4           |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 8        | 6.4           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 1        | 6.3           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 12       | 6.3           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 4        | 6.1           |
| (1,24) | 1:A:15:ARG:N | 1:A:15:ARG:CA | 1:A:15:ARG:C  | 1:A:16:LYS:N | 8        | 6.0           |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 1        | 5.9           |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 2        | 5.9           |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 3        | 5.9           |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 5        | 5.9           |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 6        | 5.9           |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 7        | 5.9           |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C | 9        | 5.9           |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key    | Atom-1       | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C  | 10       | 5.9           |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C  | 12       | 5.9           |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C  | 14       | 5.9           |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C  | 16       | 5.9           |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C  | 18       | 5.9           |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C  | 19       | 5.9           |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C  | 20       | 5.9           |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C  | 13       | 5.8           |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C  | 17       | 5.8           |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C  | 11       | 5.7           |
| (1,13) | 1:A:9:ARG:C  | 1:A:10:ASP:N  | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:C  | 15       | 5.2           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 8        | 3.9           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 4        | 3.8           |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 15       | 3.5           |
| (1,22) | 1:A:14:GLN:N | 1:A:14:GLN:CA | 1:A:14:GLN:C  | 1:A:15:ARG:N  | 15       | 3.4           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 3        | 3.3           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 5        | 3.3           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 6        | 3.3           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 10       | 3.3           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 11       | 3.3           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 12       | 3.3           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 17       | 3.3           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 18       | 3.3           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 20       | 3.3           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 1        | 3.2           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 2        | 3.2           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 7        | 3.2           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 14       | 3.2           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 15       | 3.2           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 16       | 3.2           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 9        | 3.1           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 13       | 3.1           |
| (1,8)  | 1:A:7:PHE:N  | 1:A:7:PHE:CA  | 1:A:7:PHE:C   | 1:A:8:PHE:N   | 19       | 3.1           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 2        | 3.1           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 3        | 3.1           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 15       | 3.1           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 4        | 3.0           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 7        | 3.0           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 9        | 2.9           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 10       | 2.9           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 11       | 2.9           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 12       | 2.9           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 13       | 2.9           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 17       | 2.9           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 19       | 2.8           |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 7        | 2.8           |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 11       | 2.8           |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 17       | 2.8           |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 1        | 2.7           |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 6        | 2.7           |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 9        | 2.7           |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key    | Atom-1       | Atom-2        | Atom-3        | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 10       | 2.7           |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 12       | 2.7           |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 14       | 2.7           |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 18       | 2.7           |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 20       | 2.7           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 5        | 2.6           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 14       | 2.6           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 16       | 2.6           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 18       | 2.6           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 20       | 2.6           |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 2        | 2.6           |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 3        | 2.6           |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 5        | 2.6           |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 13       | 2.6           |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 16       | 2.6           |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 19       | 2.6           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 1        | 2.5           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 6        | 2.5           |
| (1,28) | 1:A:10:ASP:N | 1:A:10:ASP:CA | 1:A:10:ASP:CB | 1:A:10:ASP:CG | 8        | 2.5           |
| (1,21) | 1:A:13:LEU:C | 1:A:14:GLN:N  | 1:A:14:GLN:CA | 1:A:14:GLN:C  | 15       | 2.4           |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 8        | 1.8           |
| (1,21) | 1:A:13:LEU:C | 1:A:14:GLN:N  | 1:A:14:GLN:CA | 1:A:14:GLN:C  | 11       | 1.7           |
| (1,16) | 1:A:11:PHE:N | 1:A:11:PHE:CA | 1:A:11:PHE:C  | 1:A:12:ILE:N  | 4        | 1.6           |