



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 3, 2023 – 05:21 AM EDT

PDB ID : 2JTY
BMRB ID : 15423
Title : Self-complemented variant of FimA, the main subunit of type 1 pilus
Authors : Erilov, D.; Wider, G.; Glockshuber, R.; Puorger, C.; Vetsch, M.
Deposited on : 2007-08-09

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

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

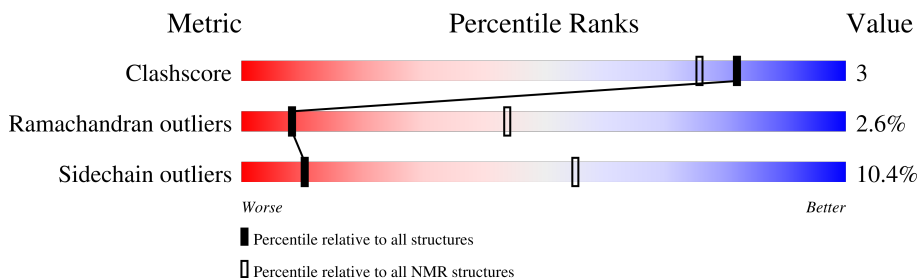
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 91%.

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



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

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

| Mol | Chain | Length | Quality of chain |
|-----|-------|--------|------------------|
| 1 | A | 184 | 77% 7% 16% |

2 Ensemble composition and analysis i

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

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

| Well-defined (core) protein residues | | | |
|--------------------------------------|---|-------------------|--------------|
| Well-defined core | Residue range (total) | Backbone RMSD (Å) | Medoid model |
| 1 | A:19-A:89, A:95-A:160, A:167-A:184 (155) | 0.54 | 1 |

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

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

The models can be grouped into 4 clusters and 2 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2489 atoms, of which 1222 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Type-1 fimbrial protein, A chain.

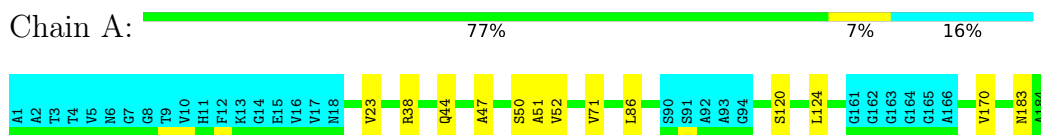
| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | | Trace |
|-----|-------|----------|-------|-----|------|-----|-----|---|-------|
| | | | Total | C | H | N | O | S | |
| 1 | A | 184 | 2489 | 773 | 1222 | 226 | 266 | 2 | 0 |

4 Residue-property plots

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: Type-1 fimbrial protein, A chain

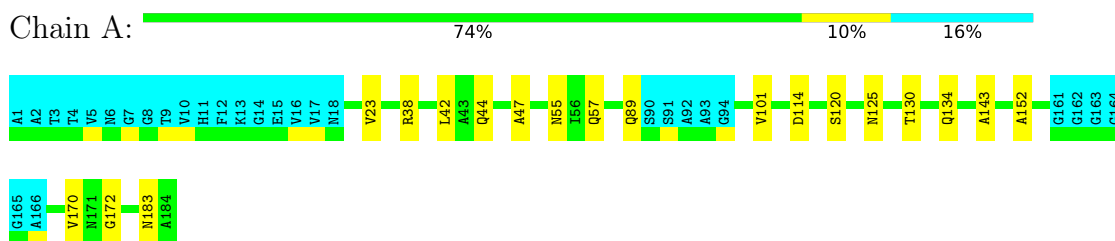


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

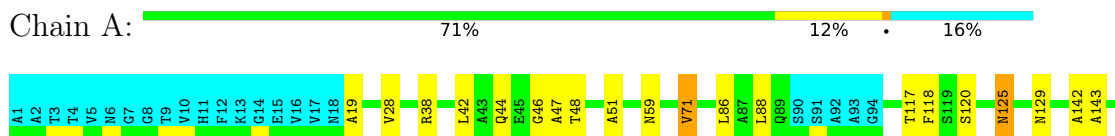
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

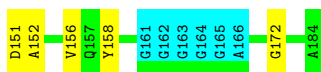
- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain

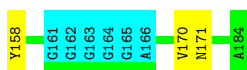




4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain

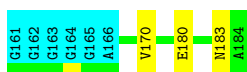
Chain A: 72% 11% 16%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain

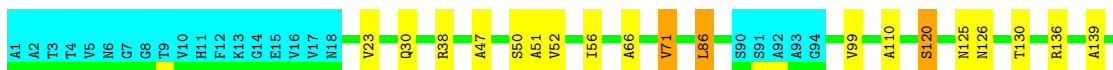
Chain A: 72% 10% 16%



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain

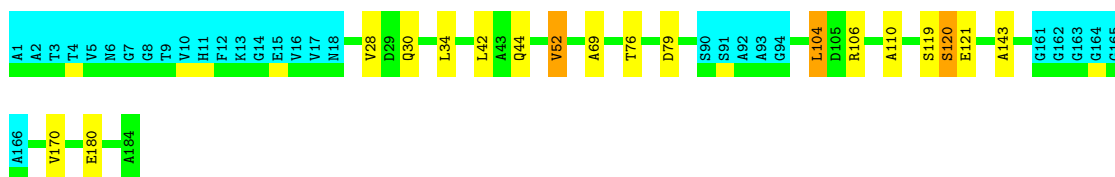
Chain A: 71% 11% 16%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain

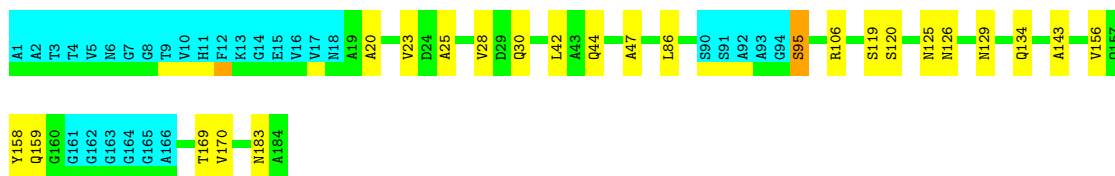
Chain A: 74% 8% 16%



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain

Chain A: 71% 12% 16%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain

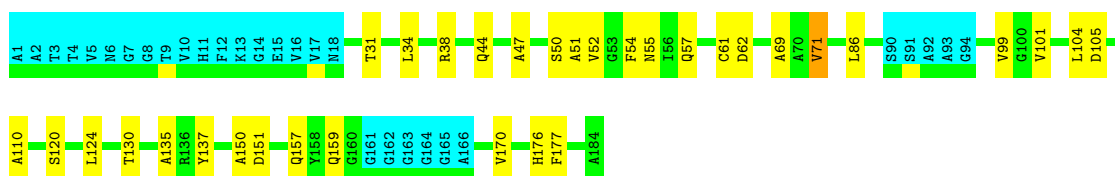
Chain A: 71% 11% 16%



4.2.9 Score per residue for model 9

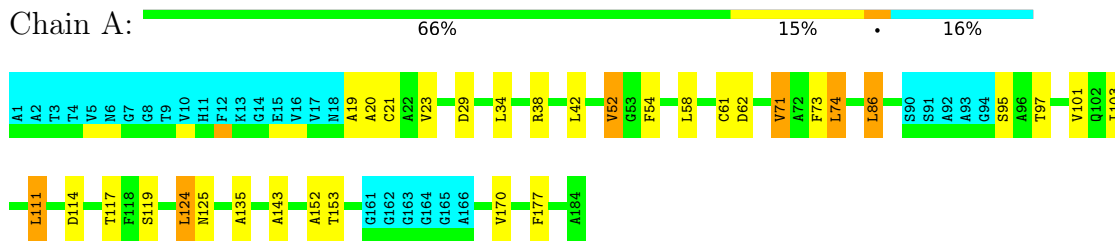
- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain

Chain A: 66% 17% 16%



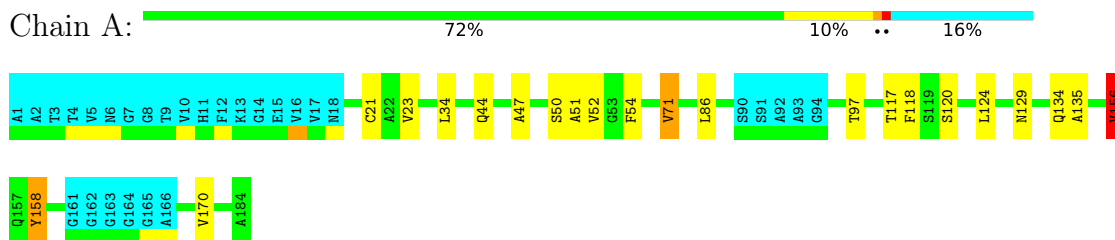
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain



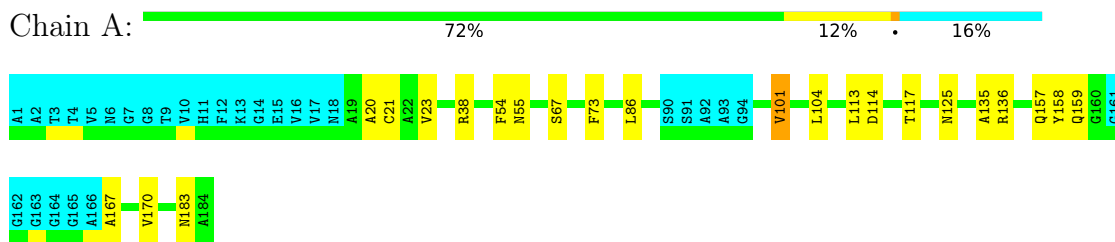
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain



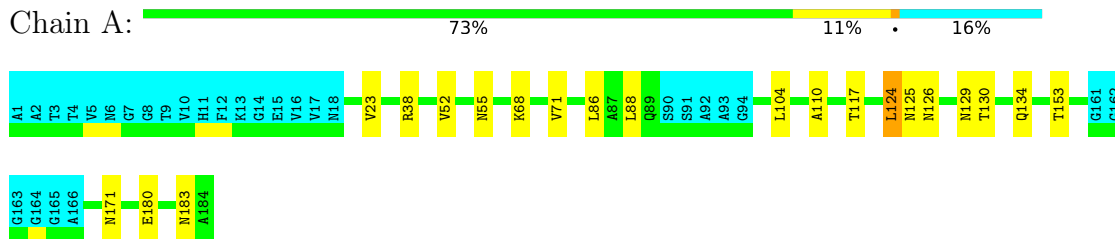
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain



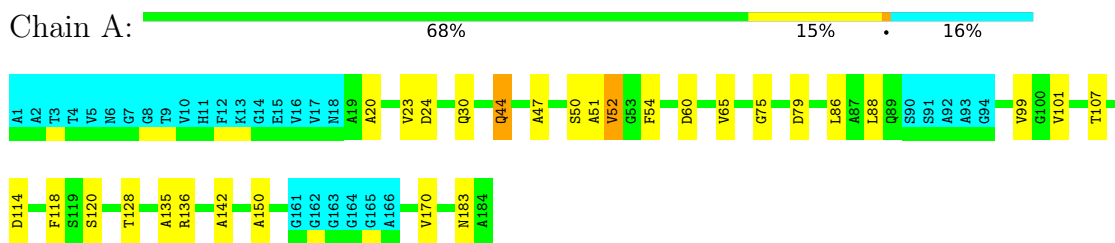
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain



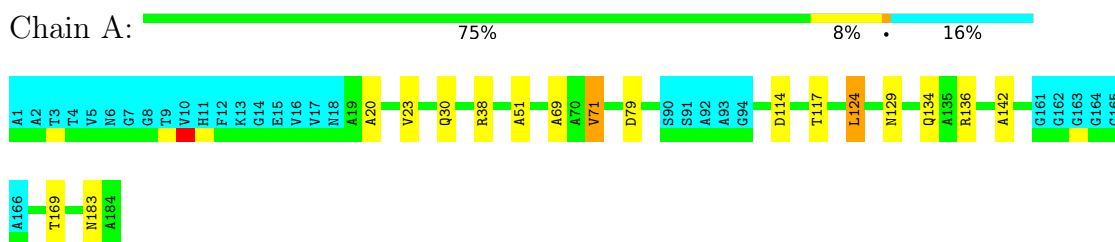
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain



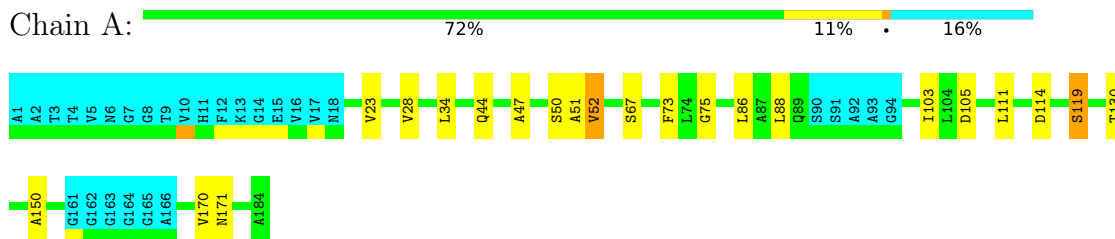
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain



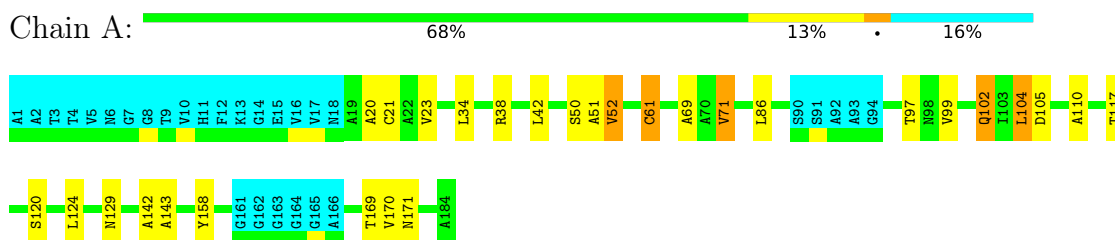
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain



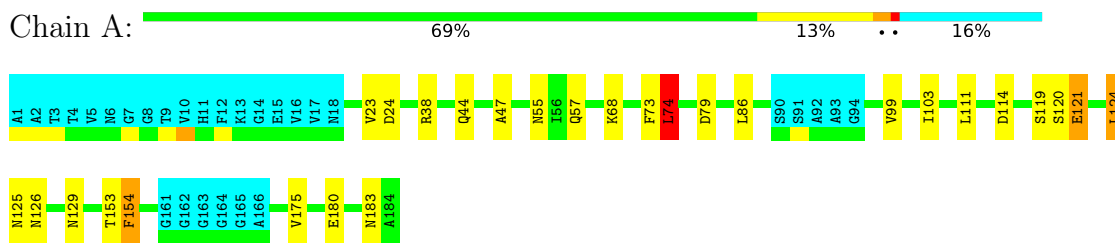
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain



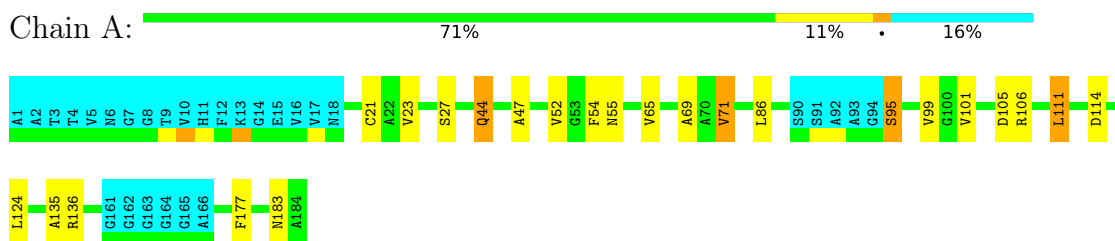
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain



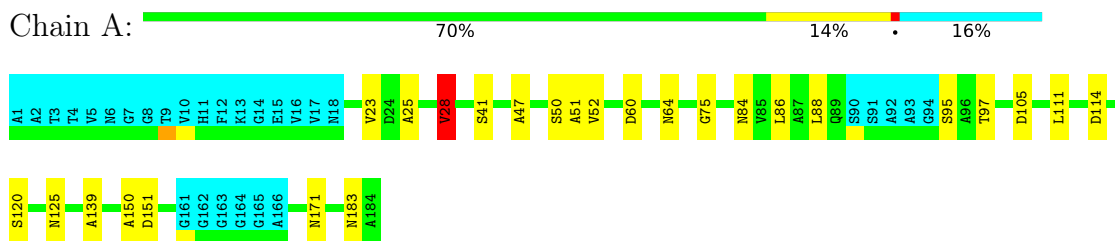
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Type-1 fimbrial protein, A chain



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

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

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

| Software name | Classification | Version |
|---------------|--------------------|---------|
| CYANA | structure solution | |
| OPAL | refinement | |

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

| | |
|--|----------------|
| Chemical shift file(s) | working_cs.cif |
| Number of chemical shift lists | 1 |
| Total number of shifts | 1932 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1932 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 91% |

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 | 0.54±0.01 | 0±0/1102 (0.0± 0.0%) | 1.07±0.04 | 2±1/1506 (0.1± 0.1%) |
| All | All | 0.54 | 0/22040 (0.0%) | 1.07 | 38/30120 (0.1%) |

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±0.8 |
| All | All | 0 | 20 |

There are no bond-length outliers.

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(°) | Ideal(°) | Models | |
|-----|-------|-----|------|------------|-------|-------------|----------|--------|-------|
| | | | | | | | | Worst | Total |
| 1 | A | 156 | VAL | CG1-CB-CG2 | 8.66 | 124.76 | 110.90 | 5 | 2 |
| 1 | A | 71 | VAL | CG1-CB-CG2 | 8.57 | 124.62 | 110.90 | 2 | 10 |
| 1 | A | 137 | TYR | CB-CG-CD2 | -7.72 | 116.36 | 121.00 | 9 | 1 |
| 1 | A | 158 | TYR | CB-CG-CD2 | -7.63 | 116.42 | 121.00 | 11 | 1 |
| 1 | A | 124 | LEU | CB-CG-CD1 | 6.79 | 122.54 | 111.00 | 15 | 2 |
| 1 | A | 104 | LEU | CB-CG-CD1 | 6.26 | 121.64 | 111.00 | 17 | 1 |
| 1 | A | 136 | ARG | NE-CZ-NH2 | -5.96 | 117.32 | 120.30 | 5 | 4 |
| 1 | A | 21 | CYS | CA-CB-SG | 5.76 | 124.36 | 114.00 | 11 | 1 |
| 1 | A | 52 | VAL | CA-CB-CG2 | 5.74 | 119.51 | 110.90 | 9 | 3 |
| 1 | A | 74 | LEU | CB-CG-CD2 | -5.64 | 101.42 | 111.00 | 18 | 1 |
| 1 | A | 28 | VAL | CA-CB-CG1 | 5.54 | 119.22 | 110.90 | 2 | 1 |
| 1 | A | 104 | LEU | CB-CG-CD2 | 5.53 | 120.40 | 111.00 | 6 | 1 |
| 1 | A | 19 | ALA | C-N-CA | 5.49 | 135.43 | 121.70 | 10 | 2 |
| 1 | A | 71 | VAL | CA-CB-CG1 | 5.49 | 119.13 | 110.90 | 13 | 1 |
| 1 | A | 156 | VAL | CA-CB-CG1 | 5.26 | 118.79 | 110.90 | 11 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms | Z | Observed(°) | Ideal(°) | Models | |
|-----|-------|-----|------|-----------|-------|-------------|----------|--------|-------|
| | | | | | | | | Worst | Total |
| 1 | A | 167 | ALA | CB-CA-C | 5.26 | 117.99 | 110.10 | 12 | 1 |
| 1 | A | 38 | ARG | NE-CZ-NH1 | 5.22 | 122.91 | 120.30 | 2 | 1 |
| 1 | A | 119 | SER | C-N-CA | 5.20 | 134.71 | 121.70 | 6 | 1 |
| 1 | A | 65 | VAL | CA-CB-CG2 | 5.18 | 118.67 | 110.90 | 4 | 1 |
| 1 | A | 106 | ARG | NE-CZ-NH2 | -5.18 | 117.71 | 120.30 | 6 | 1 |
| 1 | A | 38 | ARG | NE-CZ-NH2 | -5.18 | 117.71 | 120.30 | 17 | 1 |

There are no chirality outliers.

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

| Mol | Chain | Res | Type | Group | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|-----------|----------------|
| 1 | A | 69 | ALA | Peptide | 5 |
| 1 | A | 152 | ALA | Peptide | 3 |
| 1 | A | 38 | ARG | Sidechain | 3 |
| 1 | A | 106 | ARG | Sidechain | 2 |
| 1 | A | 95 | SER | Peptide | 2 |
| 1 | A | 119 | SER | Peptide | 2 |
| 1 | A | 46 | GLY | Peptide | 1 |
| 1 | A | 159 | GLN | Peptide | 1 |
| 1 | A | 154 | PHE | Sidechain | 1 |

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 | 1090 | 1055 | 1053 | 5±3 |
| All | All | 21800 | 21100 | 21060 | 108 |

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 3.

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

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 0.76 | 1.57 | 12 | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:44:GLN:HE21 | 1:A:47:ALA:HB2 | 0.76 | 1.40 | 14 | 9 |
| 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG23 | 0.75 | 1.59 | 11 | 2 |
| 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:CE2 | 0.72 | 2.19 | 5 | 2 |
| 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:52:VAL:CG1 | 0.72 | 2.13 | 3 | 6 |
| 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:152:ALA:HB2 | 0.67 | 1.67 | 10 | 2 |
| 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:52:VAL:HG11 | 0.62 | 1.71 | 6 | 6 |
| 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:153:THR:OG1 | 0.61 | 1.95 | 18 | 1 |
| 1:A:74:LEU:C | 1:A:74:LEU:HD23 | 0.58 | 2.19 | 18 | 1 |
| 1:A:124:LEU:H | 1:A:124:LEU:HD22 | 0.57 | 1.59 | 18 | 2 |
| 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:CG2 | 0.56 | 2.30 | 20 | 1 |
| 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:177:PHE:CD2 | 0.56 | 2.36 | 19 | 1 |
| 1:A:74:LEU:O | 1:A:152:ALA:HB1 | 0.55 | 2.02 | 10 | 1 |
| 1:A:55:ASN:HB3 | 1:A:130:THR:HG22 | 0.55 | 1.78 | 13 | 1 |
| 1:A:54:PHE:CE1 | 1:A:135:ALA:HB2 | 0.54 | 2.38 | 14 | 6 |
| 1:A:156:VAL:CG2 | 1:A:158:TYR:CE2 | 0.53 | 2.91 | 5 | 2 |
| 1:A:156:VAL:CG1 | 1:A:170:VAL:HG23 | 0.52 | 2.33 | 5 | 1 |
| 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:150:ALA:HB1 | 0.51 | 1.81 | 14 | 3 |
| 1:A:73:PHE:CE1 | 1:A:103:ILE:HG21 | 0.51 | 2.40 | 16 | 2 |
| 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:124:LEU:HD11 | 0.50 | 1.83 | 19 | 1 |
| 1:A:42:LEU:O | 1:A:143:ALA:HB3 | 0.50 | 2.06 | 6 | 6 |
| 1:A:44:GLN:NE2 | 1:A:47:ALA:HB2 | 0.50 | 2.22 | 2 | 5 |
| 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:110:ALA:HA | 0.50 | 1.84 | 13 | 2 |
| 1:A:75:GLY:HA3 | 1:A:86:LEU:HD21 | 0.48 | 1.85 | 14 | 3 |
| 1:A:68:LYS:CA | 1:A:124:LEU:HD21 | 0.48 | 2.39 | 18 | 2 |
| 1:A:31:THR:HG23 | 1:A:176:HIS:HB2 | 0.48 | 1.86 | 8 | 2 |
| 1:A:102:GLN:HE22 | 1:A:110:ALA:HB1 | 0.47 | 1.69 | 17 | 1 |
| 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:158:TYR:CZ | 0.47 | 2.45 | 3 | 2 |
| 1:A:20:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG11 | 0.47 | 1.85 | 14 | 1 |
| 1:A:19:ALA:HB1 | 1:A:158:TYR:CE2 | 0.47 | 2.45 | 2 | 1 |
| 1:A:55:ASN:HB3 | 1:A:130:THR:CG2 | 0.45 | 2.41 | 9 | 2 |
| 1:A:61:CYS:SG | 1:A:124:LEU:HD12 | 0.45 | 2.52 | 9 | 1 |
| 1:A:88:LEU:HA | 1:A:150:ALA:HB2 | 0.44 | 1.90 | 16 | 3 |
| 1:A:21:CYS:SG | 1:A:58:LEU:HB3 | 0.44 | 2.52 | 10 | 1 |
| 1:A:157:GLN:HE21 | 1:A:159:GLN:NE2 | 0.44 | 2.10 | 9 | 2 |
| 1:A:56:ILE:O | 1:A:130:THR:HG23 | 0.43 | 2.12 | 5 | 1 |
| 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:158:TYR:CE1 | 0.43 | 2.48 | 17 | 2 |
| 1:A:125:ASN:H | 1:A:129:ASN:ND2 | 0.43 | 2.11 | 13 | 1 |
| 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:158:TYR:HB3 | 0.43 | 1.90 | 5 | 1 |
| 1:A:111:LEU:H | 1:A:111:LEU:HD22 | 0.43 | 1.73 | 19 | 1 |
| 1:A:61:CYS:SG | 1:A:124:LEU:HD13 | 0.43 | 2.54 | 17 | 1 |
| 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:177:PHE:CG | 0.43 | 2.49 | 10 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|------------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:47:ALA:HB3 | 1:A:139:ALA:HB3 | 0.43 | 1.90 | 5 | 2 |
| 1:A:54:PHE:CD1 | 1:A:135:ALA:HB2 | 0.42 | 2.49 | 11 | 1 |
| 1:A:154:PHE:CD1 | 1:A:175:VAL:HG23 | 0.42 | 2.49 | 18 | 1 |
| 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:111:LEU:N | 0.41 | 2.30 | 19 | 1 |
| 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:34:LEU:N | 0.41 | 2.30 | 9 | 1 |
| 1:A:62:ASP:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 0.41 | 1.90 | 4 | 1 |
| 1:A:125:ASN:H | 1:A:129:ASN:HD21 | 0.41 | 1.59 | 2 | 1 |
| 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:NH1 | 0.41 | 2.31 | 3 | 1 |
| 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:158:TYR:CD1 | 0.41 | 2.51 | 12 | 1 |
| 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:159:GLN:O | 0.41 | 2.16 | 5 | 1 |
| 1:A:73:PHE:CD1 | 1:A:103:ILE:HG21 | 0.40 | 2.50 | 10 | 1 |
| 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG12 | 0.40 | 1.92 | 7 | 1 |
| 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:111:LEU:HD23 | 0.40 | 1.92 | 10 | 1 |

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

| Mol | Chain | Analysed | Favoured | Allowed | Outliers | Percentiles | |
|-----|-------|-----------------|---------------|--------------|------------|-------------|----|
| 1 | A | 154/184 (84%) | 131±4 (85±2%) | 19±3 (12±2%) | 4±1 (3±1%) | 8 | 44 |
| All | All | 3080/3680 (84%) | 2620 (85%) | 381 (12%) | 79 (3%) | 8 | 44 |

All 21 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 23 | VAL | 15 |
| 1 | A | 51 | ALA | 12 |
| 1 | A | 50 | SER | 8 |
| 1 | A | 117 | THR | 7 |
| 1 | A | 142 | ALA | 4 |
| 1 | A | 106 | ARG | 4 |
| 1 | A | 105 | ASP | 4 |
| 1 | A | 20 | ALA | 3 |
| 1 | A | 120 | SER | 3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 172 | GLY | 2 |
| 1 | A | 88 | LEU | 2 |
| 1 | A | 119 | SER | 2 |
| 1 | A | 110 | ALA | 2 |
| 1 | A | 126 | ASN | 2 |
| 1 | A | 121 | GLU | 2 |
| 1 | A | 95 | SER | 2 |
| 1 | A | 55 | ASN | 1 |
| 1 | A | 71 | VAL | 1 |
| 1 | A | 73 | PHE | 1 |
| 1 | A | 60 | ASP | 1 |
| 1 | A | 28 | VAL | 1 |

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

| Mol | Chain | Analysed | Rotameric | Outliers | Percentiles | |
|-----|-------|-----------------|--------------|--------------|-------------|----|
| 1 | A | 110/125 (88%) | 99±3 (90±3%) | 11±3 (10±3%) | 10 | 55 |
| All | All | 2200/2500 (88%) | 1971 (90%) | 229 (10%) | 10 | 55 |

All 62 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 | 120 | SER | 13 |
| 1 | A | 183 | ASN | 12 |
| 1 | A | 86 | LEU | 12 |
| 1 | A | 114 | ASP | 10 |
| 1 | A | 170 | VAL | 10 |
| 1 | A | 71 | VAL | 10 |
| 1 | A | 125 | ASN | 8 |
| 1 | A | 99 | VAL | 8 |
| 1 | A | 129 | ASN | 8 |
| 1 | A | 52 | VAL | 8 |
| 1 | A | 30 | GLN | 7 |
| 1 | A | 38 | ARG | 6 |
| 1 | A | 134 | GLN | 5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 171 | ASN | 5 |
| 1 | A | 111 | LEU | 5 |
| 1 | A | 124 | LEU | 5 |
| 1 | A | 57 | GLN | 4 |
| 1 | A | 180 | GLU | 4 |
| 1 | A | 156 | VAL | 4 |
| 1 | A | 79 | ASP | 4 |
| 1 | A | 55 | ASN | 4 |
| 1 | A | 97 | THR | 4 |
| 1 | A | 101 | VAL | 3 |
| 1 | A | 118 | PHE | 3 |
| 1 | A | 151 | ASP | 3 |
| 1 | A | 50 | SER | 3 |
| 1 | A | 126 | ASN | 3 |
| 1 | A | 28 | VAL | 3 |
| 1 | A | 44 | GLN | 3 |
| 1 | A | 104 | LEU | 3 |
| 1 | A | 169 | THR | 3 |
| 1 | A | 67 | SER | 3 |
| 1 | A | 21 | CYS | 3 |
| 1 | A | 31 | THR | 2 |
| 1 | A | 60 | ASP | 2 |
| 1 | A | 95 | SER | 2 |
| 1 | A | 107 | THR | 2 |
| 1 | A | 128 | THR | 2 |
| 1 | A | 62 | ASP | 2 |
| 1 | A | 61 | CYS | 2 |
| 1 | A | 74 | LEU | 2 |
| 1 | A | 119 | SER | 2 |
| 1 | A | 153 | THR | 2 |
| 1 | A | 24 | ASP | 2 |
| 1 | A | 89 | GLN | 1 |
| 1 | A | 48 | THR | 1 |
| 1 | A | 59 | ASN | 1 |
| 1 | A | 106 | ARG | 1 |
| 1 | A | 76 | THR | 1 |
| 1 | A | 58 | LEU | 1 |
| 1 | A | 29 | ASP | 1 |
| 1 | A | 113 | LEU | 1 |
| 1 | A | 136 | ARG | 1 |
| 1 | A | 130 | THR | 1 |
| 1 | A | 102 | GLN | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 105 | ASP | 1 |
| 1 | A | 121 | GLU | 1 |
| 1 | A | 27 | SER | 1 |
| 1 | A | 65 | VAL | 1 |
| 1 | A | 41 | SER | 1 |
| 1 | A | 64 | ASN | 1 |
| 1 | A | 84 | ASN | 1 |

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation [i](#)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 91% for the well-defined parts and 89% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_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 | 1932 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1932 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Number of shift outliers (ShiftChecker) | 6 |

7.1.2 Chemical shift referencing [i](#)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

| Nucleus | # values | Correction \pm precision, ppm | Suggested action |
|------------------------|----------|---------------------------------|-------------------------|
| $^{13}\text{C}_\alpha$ | 182 | 0.01 ± 0.08 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}\text{C}_\beta$ | 157 | -0.32 ± 0.16 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}\text{C}'$ | 176 | 0.16 ± 0.07 | None needed (< 0.5 ppm) |
| ^{15}N | 180 | -0.19 ± 0.20 | None needed (< 0.5 ppm) |

7.1.3 Completeness of resonance assignments [i](#)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 91%, i.e. 1691 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1863. 0 out of 25 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ^1H | ^{13}C | ^{15}N |
|-----------|---------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone | 782/787 (99%) | 324/324 (100%) | 305/310 (98%) | 153/153 (100%) |
| Sidechain | 876/972 (90%) | 590/641 (92%) | 262/298 (88%) | 24/33 (73%) |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| | Total | ¹ H | ¹³ C | ¹⁵ N |
|----------|-----------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Aromatic | 33/104 (32%) | 9/51 (18%) | 24/49 (49%) | 0/4 (0%) |
| Overall | 1691/1863 (91%) | 923/1016 (91%) | 591/657 (90%) | 177/190 (93%) |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 89%, i.e. 1932 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2159. 0 out of 29 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ¹ H | ¹³ C | ¹⁵ N |
|-----------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone | 921/941 (98%) | 383/391 (98%) | 358/368 (97%) | 180/182 (99%) |
| Sidechain | 970/1096 (89%) | 651/724 (90%) | 293/336 (87%) | 26/36 (72%) |
| Aromatic | 41/122 (34%) | 12/60 (20%) | 29/56 (52%) | 0/6 (0%) |
| Overall | 1932/2159 (89%) | 1046/1175 (89%) | 680/760 (89%) | 206/224 (92%) |

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

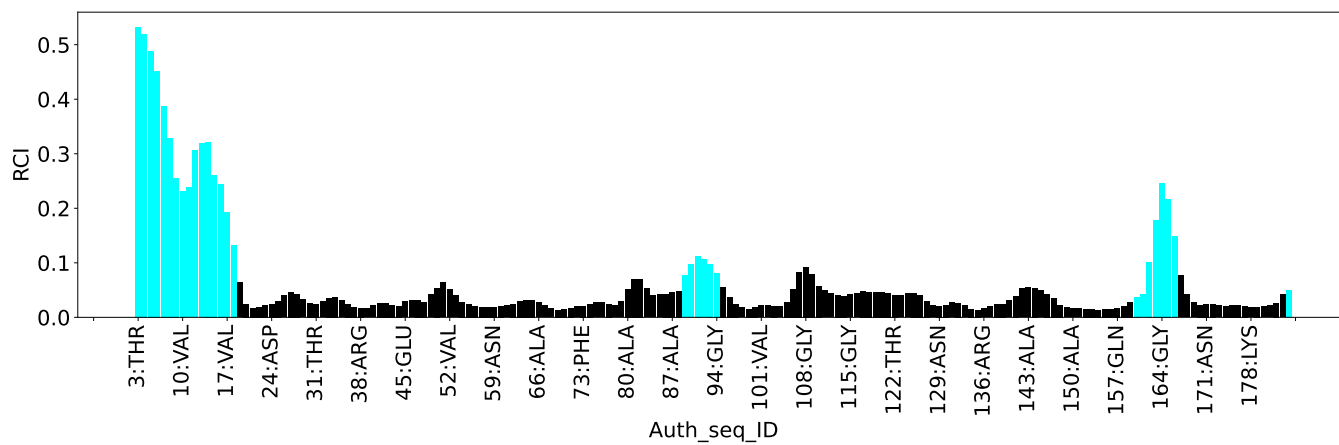
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

| List Id | Chain | Res | Type | Atom | Shift, ppm | Expected range, ppm | Z-score |
|---------|-------|-----|------|------|------------|---------------------|---------|
| 1 | A | 38 | ARG | NE | 114.70 | 76.53 – 92.65 | 18.7 |
| 1 | A | 106 | ARG | NE | 114.40 | 76.53 – 92.65 | 18.5 |
| 1 | A | 136 | ARG | NE | 113.30 | 76.53 – 92.65 | 17.8 |
| 1 | A | 72 | ALA | HB1 | -0.16 | 0.14 – 2.58 | -6.2 |
| 1 | A | 72 | ALA | HB2 | -0.16 | 0.14 – 2.58 | -6.2 |
| 1 | A | 72 | ALA | HB3 | -0.16 | 0.14 – 2.58 | -6.2 |

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis

8.1 Conformationally restricting restraints

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

| Description | Value |
|--|-------|
| Total distance restraints | 3999 |
| Intra-residue ($ i-j =0$) | 597 |
| Sequential ($ i-j =1$) | 1063 |
| Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$) | 422 |
| Long range ($ i-j \geq 5$) | 1917 |
| Inter-chain | 0 |
| Hydrogen bond restraints | 0 |
| Disulfide bond restraints | 0 |
| Total dihedral-angle restraints | 0 |
| Number of unmapped restraints | 0 |
| Number of restraints per residue | 21.7 |
| Number of long range restraints per residue ¹ | 10.4 |

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

8.2 Residual restraint violations

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

8.2.1 Average number of distance violations per model

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

| Bins (Å) | Average number of violations per model | Max (Å) |
|------------------|--|---------|
| 0.1-0.2 (Small) | 49.0 | 0.2 |
| 0.2-0.5 (Medium) | 82.6 | 0.5 |
| >0.5 (Large) | 233.4 | 3.33 |

8.2.2 Average number of dihedral-angle violations per model

Dihedral-angle violations less than 1° are not included in the calculation. There are no dihedral-angle violations

9 Distance violation analysis [i](#)

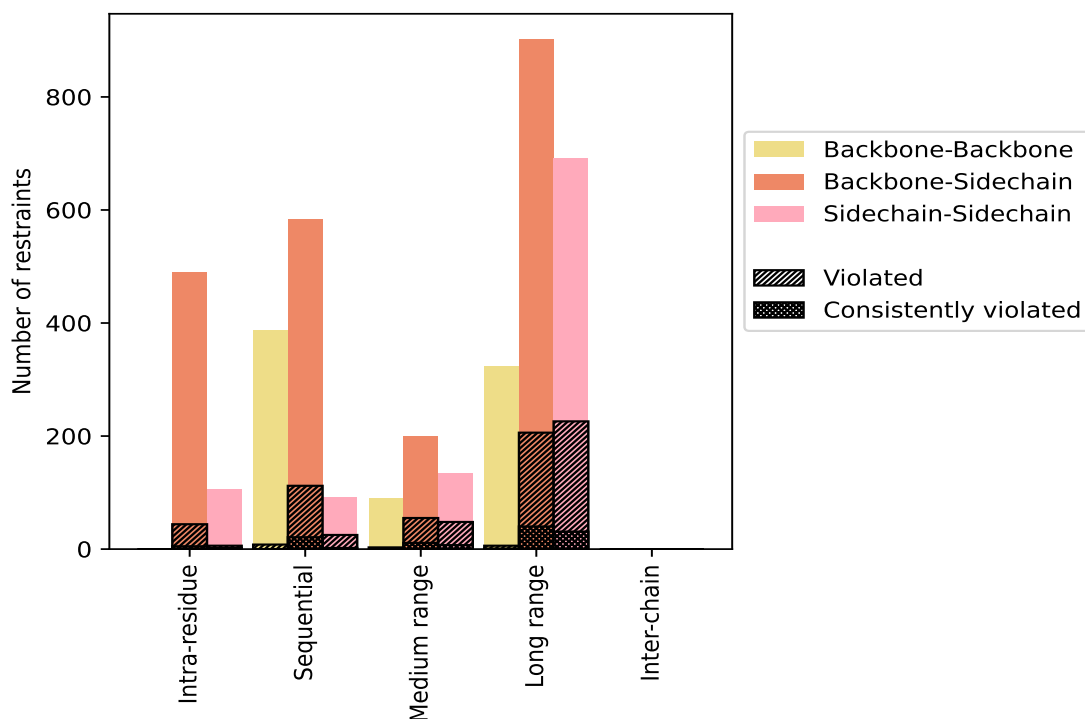
9.1 Summary of distance violations [i](#)

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

| Restrains type | Count | % ¹ | Violated ³ | | | Consistently Violated ⁴ | | |
|---|-------------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
| | | | Count | % ² | % ¹ | Count | % ² | % ¹ |
| Intra-residue ($i-j =0$) | 597 | 14.9 | 50 | 8.4 | 1.3 | 7 | 1.2 | 0.2 |
| Backbone-Backbone | 1 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 490 | 12.3 | 44 | 9.0 | 1.1 | 5 | 1.0 | 0.1 |
| Sidechain-Sidechain | 106 | 2.7 | 6 | 5.7 | 0.2 | 2 | 1.9 | 0.1 |
| Sequential ($i-j =1$) | 1063 | 26.6 | 145 | 13.6 | 3.6 | 23 | 2.2 | 0.6 |
| Backbone-Backbone | 387 | 9.7 | 8 | 2.1 | 0.2 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 584 | 14.6 | 112 | 19.2 | 2.8 | 21 | 3.6 | 0.5 |
| Sidechain-Sidechain | 92 | 2.3 | 25 | 27.2 | 0.6 | 2 | 2.2 | 0.1 |
| Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$) | 422 | 10.6 | 106 | 25.1 | 2.7 | 18 | 4.3 | 0.5 |
| Backbone-Backbone | 89 | 2.2 | 3 | 3.4 | 0.1 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 199 | 5.0 | 55 | 27.6 | 1.4 | 11 | 5.5 | 0.3 |
| Sidechain-Sidechain | 134 | 3.4 | 48 | 35.8 | 1.2 | 7 | 5.2 | 0.2 |
| Long range ($i-j \geq 5$) | 1917 | 47.9 | 438 | 22.8 | 11.0 | 72 | 3.8 | 1.8 |
| Backbone-Backbone | 323 | 8.1 | 6 | 1.9 | 0.2 | 1 | 0.3 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 902 | 22.6 | 206 | 22.8 | 5.2 | 40 | 4.4 | 1.0 |
| Sidechain-Sidechain | 692 | 17.3 | 226 | 32.7 | 5.7 | 31 | 4.5 | 0.8 |
| Inter-chain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Backbone | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sidechain-Sidechain | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Hydrogen bond | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Disulfide bond | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Total | 3999 | 100.0 | 739 | 18.5 | 18.5 | 120 | 3.0 | 3.0 |
| Backbone-Backbone | 800 | 20.0 | 17 | 2.1 | 0.4 | 1 | 0.1 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 2175 | 54.4 | 417 | 19.2 | 10.4 | 77 | 3.5 | 1.9 |
| Sidechain-Sidechain | 1024 | 25.6 | 305 | 29.8 | 7.6 | 42 | 4.1 | 1.1 |

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

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



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

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

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

| Model ID | Number of violations | | | | | | Mean (Å) | Max (Å) | SD ⁶ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
| | IR ¹ | SQ ² | MR ³ | LR ⁴ | IC ⁵ | Total | | | | |
| 1 | 17 | 62 | 44 | 205 | 0 | 328 | 0.86 | 3.3 | 0.57 | 0.75 |
| 2 | 20 | 67 | 51 | 222 | 0 | 360 | 0.85 | 2.79 | 0.58 | 0.74 |
| 3 | 25 | 68 | 56 | 230 | 0 | 379 | 0.81 | 2.97 | 0.59 | 0.69 |
| 4 | 21 | 66 | 57 | 217 | 0 | 361 | 0.84 | 2.98 | 0.57 | 0.75 |
| 5 | 21 | 72 | 63 | 217 | 0 | 373 | 0.82 | 2.82 | 0.58 | 0.7 |
| 6 | 21 | 72 | 54 | 206 | 0 | 353 | 0.82 | 2.69 | 0.57 | 0.67 |
| 7 | 24 | 73 | 57 | 227 | 0 | 381 | 0.82 | 3.0 | 0.58 | 0.7 |
| 8 | 23 | 74 | 52 | 221 | 0 | 370 | 0.85 | 2.83 | 0.58 | 0.74 |
| 9 | 20 | 63 | 53 | 222 | 0 | 358 | 0.82 | 3.23 | 0.57 | 0.71 |
| 10 | 26 | 77 | 68 | 255 | 0 | 426 | 0.84 | 3.31 | 0.6 | 0.71 |
| 11 | 20 | 69 | 52 | 211 | 0 | 352 | 0.84 | 3.19 | 0.6 | 0.74 |

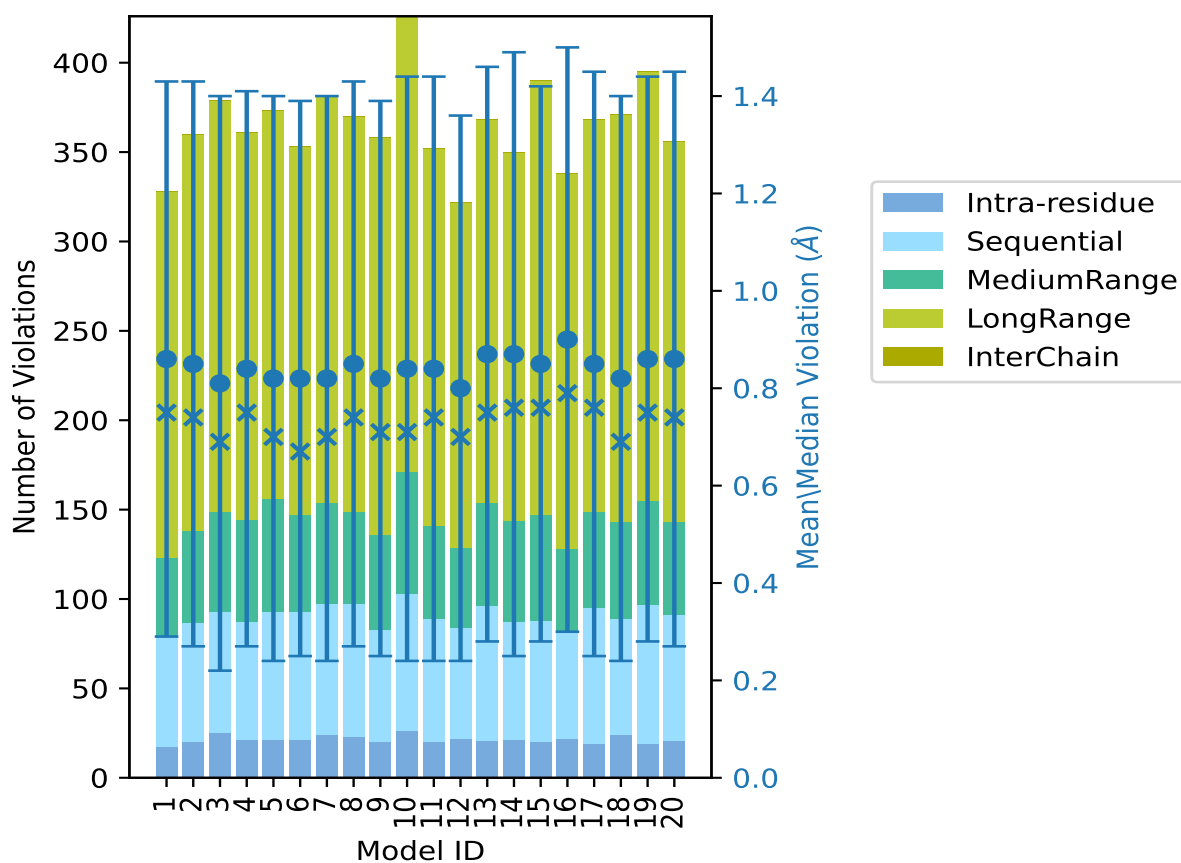
Continued on next page...

Continued from previous page...

| Model ID | Number of violations | | | | | | Mean (Å) | Max (Å) | SD ⁶ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
| | IR ¹ | SQ ² | MR ³ | LR ⁴ | IC ⁵ | Total | | | | |
| 12 | 22 | 62 | 45 | 193 | 0 | 322 | 0.8 | 2.75 | 0.56 | 0.7 |
| 13 | 21 | 75 | 58 | 214 | 0 | 368 | 0.87 | 2.93 | 0.59 | 0.75 |
| 14 | 21 | 66 | 57 | 206 | 0 | 350 | 0.87 | 3.33 | 0.62 | 0.76 |
| 15 | 20 | 68 | 59 | 243 | 0 | 390 | 0.85 | 3.02 | 0.57 | 0.76 |
| 16 | 22 | 59 | 47 | 210 | 0 | 338 | 0.9 | 3.31 | 0.6 | 0.79 |
| 17 | 19 | 76 | 54 | 219 | 0 | 368 | 0.85 | 3.31 | 0.6 | 0.76 |
| 18 | 24 | 65 | 54 | 228 | 0 | 371 | 0.82 | 3.0 | 0.58 | 0.69 |
| 19 | 19 | 78 | 58 | 240 | 0 | 395 | 0.86 | 3.23 | 0.58 | 0.75 |
| 20 | 21 | 70 | 52 | 213 | 0 | 356 | 0.86 | 2.68 | 0.59 | 0.74 |

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

9.2.1 Bar graph : Distance Violation statistics for each model [\(i\)](#)



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

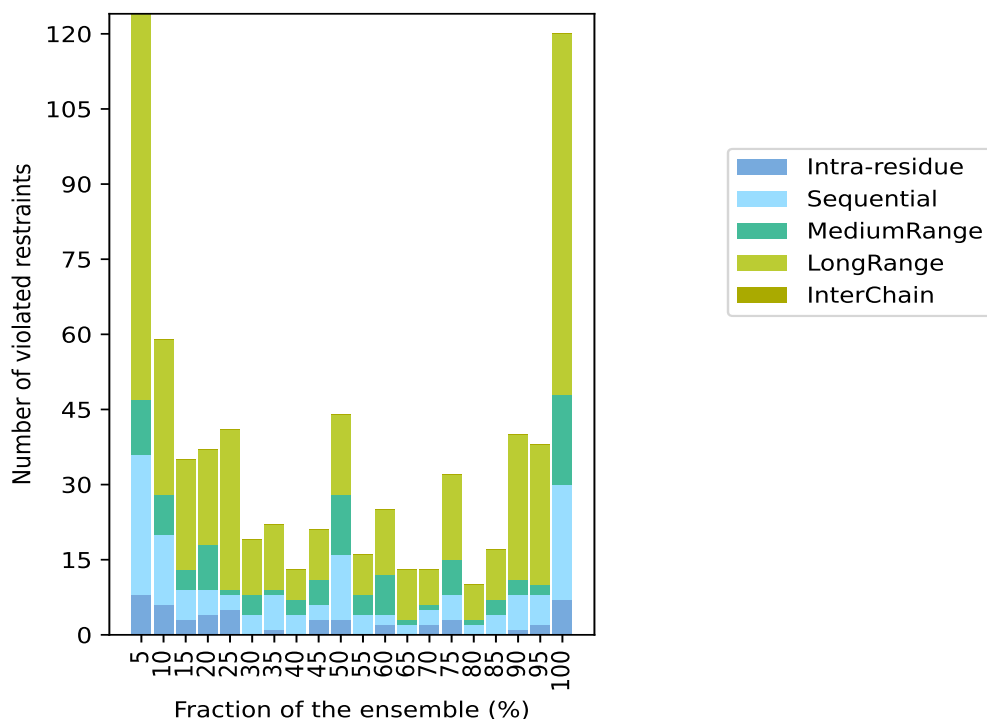
9.3 Distance violation statistics for the ensemble

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 3260(IR:547, SQ:918, MR:316, LR:1479, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

| Number of violated restraints | | | | | | Fraction of the ensemble | |
|-------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|--------------------------|-------|
| IR ¹ | SQ ² | MR ³ | LR ⁴ | IC ⁵ | Total | Count ⁶ | % |
| 8 | 28 | 11 | 77 | 0 | 124 | 1 | 5.0 |
| 6 | 14 | 8 | 31 | 0 | 59 | 2 | 10.0 |
| 3 | 6 | 4 | 22 | 0 | 35 | 3 | 15.0 |
| 4 | 5 | 9 | 19 | 0 | 37 | 4 | 20.0 |
| 5 | 3 | 1 | 32 | 0 | 41 | 5 | 25.0 |
| 0 | 4 | 4 | 11 | 0 | 19 | 6 | 30.0 |
| 1 | 7 | 1 | 13 | 0 | 22 | 7 | 35.0 |
| 0 | 4 | 3 | 6 | 0 | 13 | 8 | 40.0 |
| 3 | 3 | 5 | 10 | 0 | 21 | 9 | 45.0 |
| 3 | 13 | 12 | 16 | 0 | 44 | 10 | 50.0 |
| 0 | 4 | 4 | 8 | 0 | 16 | 11 | 55.0 |
| 2 | 2 | 8 | 13 | 0 | 25 | 12 | 60.0 |
| 0 | 2 | 1 | 10 | 0 | 13 | 13 | 65.0 |
| 2 | 3 | 1 | 7 | 0 | 13 | 14 | 70.0 |
| 3 | 5 | 7 | 17 | 0 | 32 | 15 | 75.0 |
| 0 | 2 | 1 | 7 | 0 | 10 | 16 | 80.0 |
| 0 | 4 | 3 | 10 | 0 | 17 | 17 | 85.0 |
| 1 | 7 | 3 | 29 | 0 | 40 | 18 | 90.0 |
| 2 | 6 | 2 | 28 | 0 | 38 | 19 | 95.0 |
| 7 | 23 | 18 | 72 | 0 | 120 | 20 | 100.0 |

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

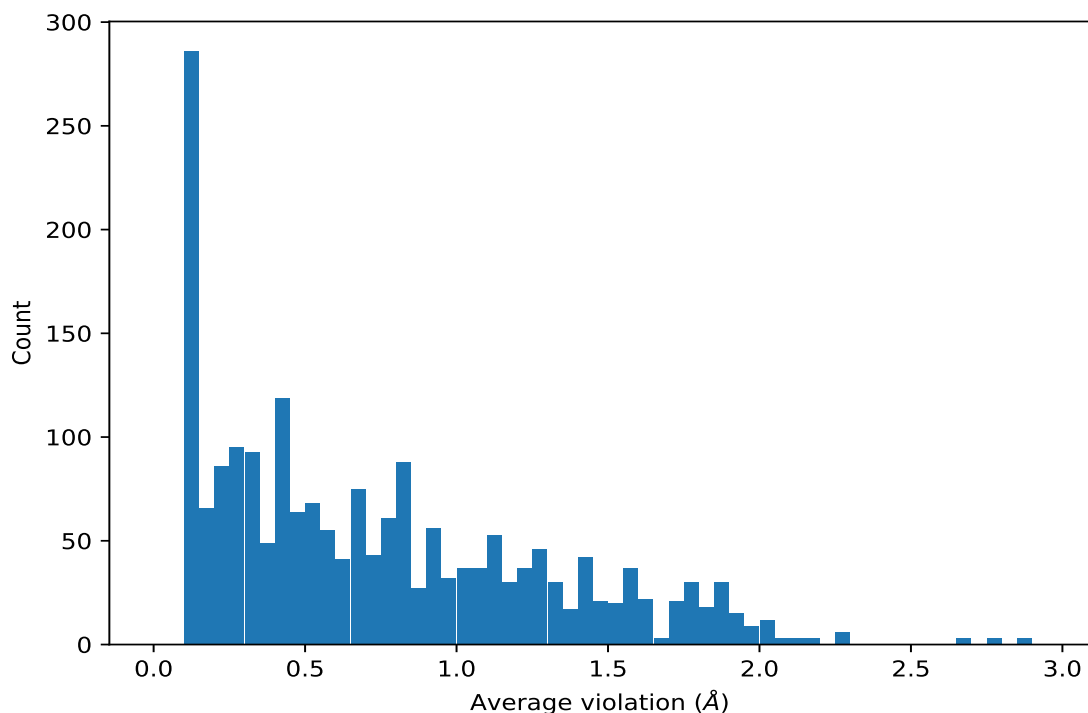
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 2.9 | 0.47 | 3.0 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 2.9 | 0.47 | 3.0 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 2.9 | 0.47 | 3.0 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 20 | 2.69 | 0.07 | 2.72 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 20 | 2.69 | 0.07 | 2.72 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 20 | 2.69 | 0.07 | 2.72 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 20 | 2.26 | 0.25 | 2.28 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 20 | 2.26 | 0.25 | 2.28 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 20 | 2.26 | 0.25 | 2.28 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 20 | 2.06 | 0.3 | 2.19 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 20 | 2.06 | 0.3 | 2.19 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 20 | 2.06 | 0.3 | 2.19 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 2.01 | 0.26 | 2.06 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 2.01 | 0.26 | 2.06 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 2.01 | 0.26 | 2.06 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 2.01 | 0.26 | 2.06 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 2.01 | 0.26 | 2.06 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 2.01 | 0.26 | 2.06 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 20 | 1.99 | 0.27 | 2.06 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 20 | 1.99 | 0.27 | 2.06 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 20 | 1.99 | 0.27 | 2.06 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 1.97 | 0.07 | 1.97 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 1.97 | 0.07 | 1.97 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 1.97 | 0.07 | 1.97 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 20 | 1.89 | 0.07 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 20 | 1.89 | 0.07 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 20 | 1.89 | 0.07 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 20 | 1.89 | 0.07 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 20 | 1.89 | 0.07 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 20 | 1.89 | 0.07 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 20 | 1.89 | 0.07 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 20 | 1.89 | 0.07 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 20 | 1.89 | 0.07 | 1.91 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 20 | 1.85 | 0.35 | 1.88 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 20 | 1.85 | 0.35 | 1.88 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 20 | 1.85 | 0.35 | 1.88 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 1.81 | 0.14 | 1.83 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 1.81 | 0.14 | 1.83 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 1.81 | 0.14 | 1.83 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 20 | 1.81 | 0.13 | 1.84 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 20 | 1.81 | 0.13 | 1.84 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 20 | 1.81 | 0.13 | 1.84 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 20 | 1.78 | 0.4 | 1.78 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 20 | 1.78 | 0.4 | 1.78 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 20 | 1.78 | 0.4 | 1.78 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 20 | 1.78 | 0.4 | 1.78 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 20 | 1.78 | 0.4 | 1.78 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 20 | 1.78 | 0.4 | 1.78 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 20 | 1.78 | 0.4 | 1.78 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 20 | 1.78 | 0.4 | 1.78 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 20 | 1.78 | 0.4 | 1.78 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 1.74 | 0.12 | 1.78 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 1.74 | 0.12 | 1.78 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 1.74 | 0.12 | 1.78 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 1.73 | 0.11 | 1.72 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 1.73 | 0.11 | 1.72 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 1.73 | 0.11 | 1.72 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 1.71 | 0.11 | 1.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 1.71 | 0.11 | 1.7 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 1.71 | 0.11 | 1.7 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 1.64 | 0.24 | 1.66 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 1.64 | 0.24 | 1.66 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 1.64 | 0.24 | 1.66 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 1.64 | 0.24 | 1.66 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 1.64 | 0.24 | 1.66 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 1.64 | 0.24 | 1.66 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 1.62 | 0.08 | 1.63 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 1.62 | 0.08 | 1.63 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 1.62 | 0.08 | 1.63 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 1.62 | 0.12 | 1.6 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 1.62 | 0.12 | 1.6 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 1.62 | 0.12 | 1.6 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 1.6 | 0.08 | 1.61 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 1.6 | 0.08 | 1.61 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 1.6 | 0.08 | 1.61 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 1.59 | 0.33 | 1.52 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 1.59 | 0.33 | 1.52 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 1.59 | 0.33 | 1.52 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 20 | 1.59 | 0.2 | 1.68 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 1.56 | 0.1 | 1.54 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 1.56 | 0.1 | 1.54 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 1.56 | 0.1 | 1.54 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 20 | 1.56 | 0.69 | 1.46 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 20 | 1.56 | 0.69 | 1.46 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 20 | 1.56 | 0.69 | 1.46 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 1.55 | 0.04 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 1.55 | 0.04 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 1.55 | 0.04 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 1.55 | 0.04 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 1.55 | 0.04 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 1.55 | 0.04 | 1.56 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 1.53 | 0.14 | 1.54 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 1.53 | 0.14 | 1.54 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 1.53 | 0.14 | 1.54 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 20 | 1.51 | 0.08 | 1.49 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 20 | 1.46 | 0.16 | 1.48 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 20 | 1.46 | 0.16 | 1.48 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 20 | 1.46 | 0.16 | 1.48 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 20 | 1.46 | 0.16 | 1.48 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 20 | 1.46 | 0.16 | 1.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 20 | 1.46 | 0.16 | 1.48 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 1.42 | 0.15 | 1.42 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 1.42 | 0.15 | 1.42 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 1.42 | 0.15 | 1.42 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 20 | 1.42 | 0.51 | 1.52 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 20 | 1.42 | 0.51 | 1.52 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 20 | 1.42 | 0.51 | 1.52 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 20 | 1.42 | 0.51 | 1.52 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 20 | 1.42 | 0.51 | 1.52 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 20 | 1.42 | 0.51 | 1.52 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 1.32 | 0.11 | 1.31 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 1.32 | 0.11 | 1.31 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 1.32 | 0.11 | 1.31 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 20 | 1.31 | 0.09 | 1.31 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 20 | 1.31 | 0.09 | 1.31 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 20 | 1.31 | 0.09 | 1.31 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 20 | 1.31 | 0.35 | 1.38 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 20 | 1.31 | 0.35 | 1.38 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 20 | 1.31 | 0.35 | 1.38 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 20 | 1.3 | 0.29 | 1.31 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 20 | 1.3 | 0.29 | 1.31 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 20 | 1.3 | 0.29 | 1.31 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 1.3 | 0.28 | 1.36 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 1.3 | 0.28 | 1.36 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 1.3 | 0.28 | 1.36 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 20 | 1.3 | 0.17 | 1.37 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 20 | 1.3 | 0.17 | 1.37 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 20 | 1.3 | 0.17 | 1.37 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 1.27 | 0.12 | 1.29 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 1.27 | 0.12 | 1.29 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 1.27 | 0.12 | 1.29 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 20 | 1.27 | 0.15 | 1.26 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 20 | 1.27 | 0.15 | 1.26 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 20 | 1.27 | 0.15 | 1.26 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 20 | 1.26 | 0.04 | 1.28 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 20 | 1.26 | 0.04 | 1.28 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 20 | 1.26 | 0.04 | 1.28 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 20 | 1.26 | 0.09 | 1.27 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 20 | 1.26 | 0.09 | 1.27 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 20 | 1.26 | 0.09 | 1.27 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 20 | 1.25 | 0.08 | 1.25 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 20 | 1.25 | 0.08 | 1.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 20 | 1.25 | 0.08 | 1.25 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 20 | 1.25 | 0.1 | 1.25 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 1.23 | 0.2 | 1.2 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 1.23 | 0.2 | 1.2 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 1.23 | 0.2 | 1.2 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 20 | 1.22 | 0.08 | 1.23 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 20 | 1.22 | 0.08 | 1.23 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 20 | 1.22 | 0.08 | 1.23 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 20 | 1.22 | 0.31 | 1.23 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 20 | 1.22 | 0.31 | 1.23 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 20 | 1.22 | 0.31 | 1.23 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 20 | 1.19 | 0.15 | 1.19 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 20 | 1.19 | 0.15 | 1.19 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 20 | 1.19 | 0.15 | 1.19 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 1.19 | 0.08 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 1.19 | 0.08 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 1.19 | 0.08 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 1.19 | 0.08 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 1.19 | 0.08 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 1.19 | 0.08 | 1.22 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 20 | 1.16 | 0.3 | 1.16 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 20 | 1.16 | 0.3 | 1.16 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 20 | 1.16 | 0.3 | 1.16 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 20 | 1.14 | 0.18 | 1.17 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 20 | 1.14 | 0.18 | 1.17 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 20 | 1.14 | 0.18 | 1.17 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 20 | 1.13 | 0.28 | 1.18 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 20 | 1.13 | 0.28 | 1.18 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 20 | 1.13 | 0.28 | 1.18 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 1.13 | 0.04 | 1.14 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 1.13 | 0.04 | 1.14 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 1.13 | 0.04 | 1.14 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 20 | 1.12 | 0.05 | 1.11 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 20 | 1.12 | 0.05 | 1.11 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 20 | 1.12 | 0.05 | 1.11 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 20 | 1.12 | 0.23 | 1.17 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 20 | 1.12 | 0.23 | 1.17 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 20 | 1.12 | 0.23 | 1.17 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 20 | 1.11 | 0.38 | 1.12 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 20 | 1.11 | 0.38 | 1.12 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 20 | 1.11 | 0.38 | 1.12 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 20 | 1.11 | 0.04 | 1.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 1.1 | 0.14 | 1.1 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 1.1 | 0.14 | 1.1 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 1.1 | 0.14 | 1.1 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 1.09 | 0.1 | 1.08 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 1.09 | 0.1 | 1.08 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 1.09 | 0.1 | 1.08 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 1.07 | 0.11 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 1.07 | 0.11 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 1.07 | 0.11 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 1.07 | 0.11 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 1.07 | 0.11 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 1.07 | 0.11 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 1.07 | 0.11 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 1.07 | 0.11 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 1.07 | 0.11 | 1.06 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 20 | 1.07 | 0.42 | 1.02 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 20 | 1.02 | 0.12 | 1.04 |
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 20 | 1.02 | 0.28 | 1.0 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 20 | 1.01 | 0.4 | 0.8 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 20 | 1.01 | 0.4 | 0.8 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 20 | 1.01 | 0.4 | 0.8 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 20 | 1.01 | 0.14 | 1.04 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 20 | 1.0 | 0.19 | 1.04 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 20 | 1.0 | 0.19 | 1.04 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 20 | 1.0 | 0.19 | 1.04 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 20 | 0.99 | 0.25 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 20 | 0.99 | 0.25 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 20 | 0.99 | 0.25 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 20 | 0.99 | 0.25 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 20 | 0.99 | 0.25 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 20 | 0.99 | 0.25 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 20 | 0.99 | 0.25 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 20 | 0.99 | 0.25 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 20 | 0.99 | 0.25 | 1.06 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 20 | 0.94 | 0.15 | 0.92 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 20 | 0.94 | 0.15 | 0.92 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 20 | 0.94 | 0.15 | 0.92 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 0.92 | 0.05 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 0.92 | 0.05 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 0.92 | 0.05 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 0.92 | 0.05 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 0.92 | 0.05 | 0.93 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 0.92 | 0.05 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 0.92 | 0.05 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 0.92 | 0.05 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 0.92 | 0.05 | 0.93 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 20 | 0.9 | 0.26 | 0.9 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 20 | 0.88 | 0.29 | 0.86 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 20 | 0.88 | 0.29 | 0.86 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 20 | 0.88 | 0.29 | 0.86 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 20 | 0.87 | 0.19 | 0.92 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 20 | 0.87 | 0.05 | 0.89 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 20 | 0.87 | 0.05 | 0.89 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 20 | 0.87 | 0.05 | 0.89 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 20 | 0.86 | 0.17 | 0.89 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 20 | 0.85 | 0.18 | 0.9 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 20 | 0.83 | 0.05 | 0.84 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 20 | 0.82 | 0.18 | 0.89 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 20 | 0.82 | 0.09 | 0.85 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 20 | 0.82 | 0.09 | 0.85 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 20 | 0.82 | 0.09 | 0.85 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 20 | 0.81 | 0.2 | 0.8 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 20 | 0.81 | 0.2 | 0.8 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 20 | 0.81 | 0.2 | 0.8 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 20 | 0.8 | 0.18 | 0.8 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 20 | 0.8 | 0.18 | 0.8 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 20 | 0.8 | 0.18 | 0.8 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 20 | 0.8 | 0.18 | 0.8 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 20 | 0.8 | 0.18 | 0.8 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 20 | 0.8 | 0.18 | 0.8 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 20 | 0.8 | 0.28 | 0.82 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 20 | 0.79 | 0.24 | 0.78 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 20 | 0.79 | 0.24 | 0.78 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 20 | 0.79 | 0.24 | 0.78 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 20 | 0.79 | 0.24 | 0.78 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 20 | 0.79 | 0.24 | 0.78 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 20 | 0.79 | 0.24 | 0.78 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 20 | 0.79 | 0.24 | 0.78 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 20 | 0.79 | 0.24 | 0.78 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 20 | 0.79 | 0.24 | 0.78 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 0.78 | 0.28 | 0.79 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 0.78 | 0.28 | 0.79 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 0.78 | 0.28 | 0.79 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 0.78 | 0.16 | 0.74 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 0.78 | 0.16 | 0.74 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 0.78 | 0.16 | 0.74 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 20 | 0.77 | 0.12 | 0.78 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 20 | 0.77 | 0.05 | 0.78 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 20 | 0.75 | 0.18 | 0.76 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 20 | 0.74 | 0.02 | 0.74 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.69 | 0.16 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.69 | 0.16 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.69 | 0.16 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.69 | 0.16 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.69 | 0.16 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.69 | 0.16 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.69 | 0.16 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.69 | 0.16 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.69 | 0.16 | 0.66 |
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 20 | 0.67 | 0.3 | 0.64 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 20 | 0.66 | 0.18 | 0.64 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 20 | 0.66 | 0.18 | 0.64 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 20 | 0.66 | 0.18 | 0.64 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 20 | 0.66 | 0.21 | 0.64 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 20 | 0.66 | 0.21 | 0.64 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 20 | 0.66 | 0.21 | 0.64 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 20 | 0.65 | 0.11 | 0.7 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 20 | 0.65 | 0.11 | 0.7 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 20 | 0.65 | 0.11 | 0.7 |
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 20 | 0.65 | 0.2 | 0.7 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 20 | 0.64 | 0.04 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 20 | 0.64 | 0.04 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 20 | 0.64 | 0.04 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 20 | 0.64 | 0.04 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 20 | 0.64 | 0.04 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 20 | 0.64 | 0.04 | 0.66 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 20 | 0.63 | 0.16 | 0.63 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 20 | 0.63 | 0.16 | 0.63 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 0.62 | 0.07 | 0.62 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 0.62 | 0.07 | 0.62 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 0.62 | 0.07 | 0.62 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 20 | 0.62 | 0.09 | 0.6 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 20 | 0.62 | 0.09 | 0.6 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 20 | 0.62 | 0.09 | 0.6 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 0.61 | 0.26 | 0.64 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 0.61 | 0.26 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 0.61 | 0.26 | 0.64 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 0.61 | 0.26 | 0.64 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 0.61 | 0.26 | 0.64 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 0.61 | 0.26 | 0.64 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 20 | 0.57 | 0.14 | 0.59 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 20 | 0.57 | 0.07 | 0.58 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 20 | 0.56 | 0.05 | 0.56 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 20 | 0.56 | 0.21 | 0.61 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.55 | 0.22 | 0.5 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.55 | 0.22 | 0.5 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.55 | 0.22 | 0.5 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 20 | 0.55 | 0.15 | 0.6 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 20 | 0.55 | 0.15 | 0.6 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 20 | 0.55 | 0.15 | 0.6 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.54 | 0.12 | 0.55 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.54 | 0.12 | 0.55 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.54 | 0.12 | 0.55 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 0.51 | 0.08 | 0.51 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 0.51 | 0.08 | 0.51 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 0.51 | 0.08 | 0.51 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 20 | 0.51 | 0.08 | 0.49 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 20 | 0.51 | 0.08 | 0.49 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 20 | 0.51 | 0.08 | 0.49 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 20 | 0.48 | 0.05 | 0.48 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 20 | 0.48 | 0.05 | 0.48 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 20 | 0.48 | 0.05 | 0.48 |
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 20 | 0.48 | 0.13 | 0.48 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 20 | 0.46 | 0.09 | 0.5 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 20 | 0.46 | 0.09 | 0.5 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 20 | 0.46 | 0.09 | 0.5 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 20 | 0.46 | 0.09 | 0.5 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 20 | 0.46 | 0.09 | 0.5 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 20 | 0.46 | 0.09 | 0.5 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 20 | 0.43 | 0.13 | 0.47 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 20 | 0.42 | 0.06 | 0.43 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 20 | 0.42 | 0.06 | 0.43 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 20 | 0.42 | 0.06 | 0.43 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 20 | 0.41 | 0.08 | 0.44 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 20 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 20 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 20 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 20 | 0.38 | 0.06 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 20 | 0.37 | 0.04 | 0.38 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 20 | 0.36 | 0.1 | 0.37 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 20 | 0.36 | 0.1 | 0.37 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 20 | 0.36 | 0.1 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.36 | 0.11 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.36 | 0.11 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.36 | 0.11 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.36 | 0.11 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.36 | 0.11 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.36 | 0.11 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.36 | 0.11 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.36 | 0.11 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.36 | 0.11 | 0.37 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 20 | 0.32 | 0.07 | 0.34 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 20 | 0.28 | 0.1 | 0.26 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 20 | 0.26 | 0.05 | 0.28 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.24 | 0.05 | 0.24 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.24 | 0.05 | 0.24 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.24 | 0.05 | 0.24 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 19 | 2.12 | 0.24 | 2.12 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 19 | 2.12 | 0.24 | 2.12 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 19 | 2.12 | 0.24 | 2.12 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 19 | 1.93 | 0.16 | 1.93 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 19 | 1.93 | 0.16 | 1.93 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 19 | 1.93 | 0.16 | 1.93 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 19 | 1.88 | 0.61 | 2.06 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 19 | 1.88 | 0.61 | 2.06 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 19 | 1.88 | 0.61 | 2.06 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 19 | 1.86 | 0.17 | 1.91 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 19 | 1.86 | 0.17 | 1.91 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 19 | 1.86 | 0.17 | 1.91 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 19 | 1.86 | 0.17 | 1.91 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 19 | 1.86 | 0.17 | 1.91 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 19 | 1.86 | 0.17 | 1.91 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 19 | 1.86 | 0.17 | 1.91 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 19 | 1.86 | 0.17 | 1.91 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 19 | 1.86 | 0.17 | 1.91 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 19 | 1.65 | 0.1 | 1.65 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 19 | 1.65 | 0.1 | 1.65 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 19 | 1.65 | 0.1 | 1.65 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 19 | 1.63 | 0.13 | 1.67 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 19 | 1.46 | 0.11 | 1.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 19 | 1.46 | 0.11 | 1.5 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 19 | 1.46 | 0.11 | 1.5 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 19 | 1.42 | 0.73 | 1.68 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 19 | 1.42 | 0.73 | 1.68 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 19 | 1.42 | 0.73 | 1.68 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 19 | 1.42 | 0.73 | 1.68 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 19 | 1.42 | 0.73 | 1.68 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 19 | 1.42 | 0.73 | 1.68 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 19 | 1.42 | 0.73 | 1.68 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 19 | 1.42 | 0.73 | 1.68 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 19 | 1.42 | 0.73 | 1.68 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 19 | 1.39 | 0.23 | 1.39 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 19 | 1.39 | 0.23 | 1.39 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 19 | 1.39 | 0.23 | 1.39 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 19 | 1.37 | 0.65 | 1.46 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 19 | 1.37 | 0.65 | 1.46 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 19 | 1.37 | 0.65 | 1.46 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 19 | 1.25 | 0.12 | 1.27 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 19 | 1.25 | 0.12 | 1.27 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 19 | 1.25 | 0.12 | 1.27 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 19 | 1.23 | 0.17 | 1.15 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 19 | 1.23 | 0.17 | 1.15 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 19 | 1.23 | 0.17 | 1.15 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 19 | 1.22 | 0.02 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 19 | 1.22 | 0.02 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 19 | 1.22 | 0.02 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 19 | 1.22 | 0.02 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 19 | 1.22 | 0.02 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 19 | 1.22 | 0.02 | 1.22 |
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 19 | 1.21 | 0.22 | 1.23 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 19 | 1.12 | 0.53 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 19 | 1.12 | 0.53 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 19 | 1.12 | 0.53 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 19 | 1.12 | 0.53 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 19 | 1.12 | 0.53 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 19 | 1.12 | 0.53 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 19 | 1.12 | 0.53 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 19 | 1.12 | 0.53 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 19 | 1.12 | 0.53 | 0.97 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 19 | 1.11 | 0.17 | 1.15 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 19 | 1.1 | 0.3 | 1.22 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 19 | 1.1 | 0.3 | 1.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 19 | 1.1 | 0.3 | 1.22 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 19 | 1.05 | 0.17 | 1.04 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 19 | 1.05 | 0.17 | 1.04 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 19 | 1.05 | 0.17 | 1.04 |
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 19 | 0.99 | 0.19 | 1.06 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 19 | 0.94 | 0.19 | 0.95 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 19 | 0.91 | 0.06 | 0.91 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 19 | 0.91 | 0.06 | 0.91 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 19 | 0.91 | 0.06 | 0.91 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 19 | 0.87 | 0.19 | 0.85 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 19 | 0.87 | 0.19 | 0.85 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 19 | 0.87 | 0.19 | 0.85 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 19 | 0.87 | 0.19 | 0.85 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 19 | 0.87 | 0.19 | 0.85 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 19 | 0.87 | 0.19 | 0.85 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 19 | 0.84 | 0.2 | 0.92 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 19 | 0.84 | 0.2 | 0.92 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 19 | 0.84 | 0.2 | 0.92 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 19 | 0.83 | 0.19 | 0.85 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 19 | 0.83 | 0.19 | 0.85 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 19 | 0.83 | 0.19 | 0.85 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 19 | 0.8 | 0.11 | 0.78 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 19 | 0.8 | 0.11 | 0.78 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 19 | 0.8 | 0.11 | 0.78 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 19 | 0.8 | 0.11 | 0.78 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 19 | 0.8 | 0.11 | 0.78 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 19 | 0.8 | 0.11 | 0.78 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 19 | 0.77 | 0.25 | 0.8 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 19 | 0.69 | 0.2 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 19 | 0.69 | 0.2 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 19 | 0.69 | 0.2 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 19 | 0.69 | 0.2 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 19 | 0.69 | 0.2 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 19 | 0.69 | 0.2 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 19 | 0.69 | 0.2 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 19 | 0.69 | 0.2 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 19 | 0.69 | 0.2 | 0.69 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 19 | 0.65 | 0.11 | 0.7 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 19 | 0.65 | 0.11 | 0.7 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 19 | 0.65 | 0.11 | 0.7 |
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 19 | 0.63 | 0.17 | 0.64 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 19 | 0.59 | 0.22 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 19 | 0.59 | 0.22 | 0.64 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 19 | 0.58 | 0.16 | 0.62 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 19 | 0.58 | 0.16 | 0.62 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 19 | 0.58 | 0.16 | 0.62 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 19 | 0.56 | 0.12 | 0.56 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 19 | 0.56 | 0.12 | 0.56 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 19 | 0.56 | 0.12 | 0.56 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 19 | 0.56 | 0.12 | 0.56 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 19 | 0.56 | 0.12 | 0.56 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 19 | 0.56 | 0.12 | 0.56 |
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 19 | 0.33 | 0.14 | 0.31 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 19 | 0.32 | 0.05 | 0.34 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 19 | 0.31 | 0.1 | 0.3 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 19 | 0.3 | 0.13 | 0.25 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 19 | 0.3 | 0.13 | 0.25 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 19 | 0.3 | 0.13 | 0.25 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 19 | 0.29 | 0.11 | 0.25 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 19 | 0.23 | 0.05 | 0.23 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 19 | 0.23 | 0.05 | 0.23 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 19 | 0.23 | 0.05 | 0.23 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG21 | 18 | 2.0 | 0.23 | 2.04 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG22 | 18 | 2.0 | 0.23 | 2.04 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG23 | 18 | 2.0 | 0.23 | 2.04 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG11 | 18 | 1.85 | 0.11 | 1.89 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG12 | 18 | 1.85 | 0.11 | 1.89 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG13 | 18 | 1.85 | 0.11 | 1.89 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:H | 18 | 1.76 | 0.2 | 1.85 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:111:LEU:H | 18 | 1.76 | 0.2 | 1.85 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:111:LEU:H | 18 | 1.76 | 0.2 | 1.85 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:H | 18 | 1.72 | 0.42 | 1.74 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 18 | 1.72 | 0.42 | 1.74 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:H | 18 | 1.72 | 0.42 | 1.74 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:HB | 18 | 1.59 | 0.19 | 1.67 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:HB | 18 | 1.59 | 0.19 | 1.67 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:HB | 18 | 1.59 | 0.19 | 1.67 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:H | 18 | 1.58 | 0.21 | 1.62 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:H | 18 | 1.58 | 0.21 | 1.62 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:H | 18 | 1.58 | 0.21 | 1.62 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 18 | 1.57 | 0.4 | 1.58 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 18 | 1.57 | 0.4 | 1.58 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 18 | 1.57 | 0.4 | 1.58 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE3 | 18 | 1.54 | 0.49 | 1.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE3 | 18 | 1.54 | 0.49 | 1.67 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE3 | 18 | 1.54 | 0.49 | 1.67 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 1.53 | 0.38 | 1.63 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 1.53 | 0.38 | 1.63 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 1.53 | 0.38 | 1.63 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 1.53 | 0.38 | 1.63 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 1.53 | 0.38 | 1.63 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 1.53 | 0.38 | 1.63 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 1.53 | 0.38 | 1.63 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 1.53 | 0.38 | 1.63 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 1.53 | 0.38 | 1.63 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 18 | 1.43 | 0.32 | 1.42 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 18 | 1.43 | 0.32 | 1.42 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 18 | 1.43 | 0.32 | 1.42 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 1.38 | 0.22 | 1.38 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 1.38 | 0.22 | 1.38 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 1.38 | 0.22 | 1.38 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 1.38 | 0.22 | 1.38 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 1.38 | 0.22 | 1.38 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 1.38 | 0.22 | 1.38 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 1.38 | 0.22 | 1.38 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 1.38 | 0.22 | 1.38 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 1.38 | 0.22 | 1.38 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HA | 18 | 1.33 | 0.06 | 1.35 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HA | 18 | 1.33 | 0.06 | 1.35 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HA | 18 | 1.33 | 0.06 | 1.35 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 18 | 1.32 | 0.24 | 1.37 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 18 | 1.32 | 0.24 | 1.37 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 18 | 1.32 | 0.24 | 1.37 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 18 | 1.32 | 0.24 | 1.37 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 18 | 1.32 | 0.24 | 1.37 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 18 | 1.32 | 0.24 | 1.37 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:HA | 18 | 1.29 | 0.41 | 1.25 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:HA | 18 | 1.29 | 0.41 | 1.25 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:HA | 18 | 1.29 | 0.41 | 1.25 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 18 | 1.24 | 0.2 | 1.23 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 18 | 1.24 | 0.2 | 1.23 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 18 | 1.24 | 0.2 | 1.23 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG11 | 18 | 1.24 | 0.2 | 1.23 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG12 | 18 | 1.24 | 0.2 | 1.23 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG13 | 18 | 1.24 | 0.2 | 1.23 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG2 | 18 | 1.23 | 0.24 | 1.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG3 | 18 | 1.23 | 0.24 | 1.22 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG2 | 18 | 1.23 | 0.24 | 1.22 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG3 | 18 | 1.23 | 0.24 | 1.22 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 18 | 1.23 | 0.24 | 1.22 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 18 | 1.23 | 0.24 | 1.22 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HA | 18 | 1.19 | 0.1 | 1.19 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HA | 18 | 1.19 | 0.1 | 1.19 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HA | 18 | 1.19 | 0.1 | 1.19 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE2 | 18 | 1.15 | 0.44 | 1.21 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE2 | 18 | 1.15 | 0.44 | 1.21 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE2 | 18 | 1.15 | 0.44 | 1.21 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 18 | 1.12 | 0.44 | 1.08 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 18 | 1.12 | 0.44 | 1.08 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 18 | 1.12 | 0.44 | 1.08 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 18 | 1.06 | 0.29 | 1.0 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 18 | 1.06 | 0.29 | 1.0 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 18 | 1.06 | 0.29 | 1.0 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HA | 18 | 1.02 | 0.25 | 0.98 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HA | 18 | 1.02 | 0.25 | 0.98 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HA | 18 | 1.02 | 0.25 | 0.98 |
| (1,3490) | 1:A:106:ARG:HB3 | 1:A:107:THR:HA | 18 | 0.93 | 0.07 | 0.93 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:HA3 | 18 | 0.87 | 0.07 | 0.89 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:HA3 | 18 | 0.87 | 0.07 | 0.89 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:HA3 | 18 | 0.87 | 0.07 | 0.89 |
| (1,3024) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:159:GLN:HB3 | 18 | 0.86 | 0.09 | 0.86 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:H | 18 | 0.84 | 0.04 | 0.85 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:H | 18 | 0.84 | 0.04 | 0.85 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:H | 18 | 0.84 | 0.04 | 0.85 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG21 | 18 | 0.81 | 0.46 | 0.76 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG22 | 18 | 0.81 | 0.46 | 0.76 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG23 | 18 | 0.81 | 0.46 | 0.76 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG21 | 18 | 0.81 | 0.46 | 0.76 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG22 | 18 | 0.81 | 0.46 | 0.76 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG23 | 18 | 0.81 | 0.46 | 0.76 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG21 | 18 | 0.81 | 0.46 | 0.76 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG22 | 18 | 0.81 | 0.46 | 0.76 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG23 | 18 | 0.81 | 0.46 | 0.76 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB1 | 18 | 0.73 | 0.22 | 0.75 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB2 | 18 | 0.73 | 0.22 | 0.75 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB3 | 18 | 0.73 | 0.22 | 0.75 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB1 | 18 | 0.73 | 0.22 | 0.75 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB2 | 18 | 0.73 | 0.22 | 0.75 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB3 | 18 | 0.73 | 0.22 | 0.75 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB1 | 18 | 0.73 | 0.22 | 0.75 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB2 | 18 | 0.73 | 0.22 | 0.75 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB3 | 18 | 0.73 | 0.22 | 0.75 |
| (1,3322) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:159:GLN:HB3 | 18 | 0.72 | 0.07 | 0.73 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG21 | 18 | 0.71 | 0.28 | 0.62 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG22 | 18 | 0.71 | 0.28 | 0.62 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG23 | 18 | 0.71 | 0.28 | 0.62 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG21 | 18 | 0.71 | 0.28 | 0.62 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG22 | 18 | 0.71 | 0.28 | 0.62 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG23 | 18 | 0.71 | 0.28 | 0.62 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG21 | 18 | 0.71 | 0.28 | 0.62 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG22 | 18 | 0.71 | 0.28 | 0.62 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG23 | 18 | 0.71 | 0.28 | 0.62 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD11 | 18 | 0.71 | 0.03 | 0.72 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD12 | 18 | 0.71 | 0.03 | 0.72 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD13 | 18 | 0.71 | 0.03 | 0.72 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 18 | 0.63 | 0.3 | 0.62 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 18 | 0.63 | 0.3 | 0.62 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 18 | 0.63 | 0.3 | 0.62 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 18 | 0.62 | 0.1 | 0.62 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 18 | 0.62 | 0.1 | 0.62 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 18 | 0.62 | 0.1 | 0.62 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 18 | 0.48 | 0.23 | 0.4 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 18 | 0.48 | 0.23 | 0.4 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 18 | 0.48 | 0.23 | 0.4 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 18 | 0.48 | 0.23 | 0.4 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 18 | 0.48 | 0.23 | 0.4 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 18 | 0.48 | 0.23 | 0.4 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 18 | 0.45 | 0.26 | 0.49 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 18 | 0.45 | 0.26 | 0.49 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 18 | 0.45 | 0.26 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 18 | 0.44 | 0.09 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 18 | 0.44 | 0.09 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 18 | 0.44 | 0.09 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 18 | 0.44 | 0.09 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 18 | 0.44 | 0.09 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 18 | 0.44 | 0.09 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 18 | 0.44 | 0.09 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 18 | 0.44 | 0.09 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 18 | 0.44 | 0.09 | 0.48 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD11 | 18 | 0.43 | 0.2 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD12 | 18 | 0.43 | 0.2 | 0.49 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD13 | 18 | 0.43 | 0.2 | 0.49 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 18 | 0.41 | 0.14 | 0.47 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 18 | 0.41 | 0.14 | 0.47 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 18 | 0.41 | 0.14 | 0.47 |
| (1,857) | 1:A:49:SER:H | 1:A:136:ARG:HD3 | 18 | 0.4 | 0.2 | 0.38 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB1 | 18 | 0.34 | 0.1 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB2 | 18 | 0.34 | 0.1 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB3 | 18 | 0.34 | 0.1 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB1 | 18 | 0.34 | 0.1 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB2 | 18 | 0.34 | 0.1 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB3 | 18 | 0.34 | 0.1 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB1 | 18 | 0.34 | 0.1 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB2 | 18 | 0.34 | 0.1 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB3 | 18 | 0.34 | 0.1 | 0.33 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:183:ASN:HB3 | 18 | 0.32 | 0.12 | 0.3 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:183:ASN:HB3 | 18 | 0.32 | 0.12 | 0.3 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:183:ASN:HB3 | 18 | 0.32 | 0.12 | 0.3 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE22 | 17 | 1.02 | 0.53 | 1.14 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE22 | 17 | 1.02 | 0.53 | 1.14 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE22 | 17 | 1.02 | 0.53 | 1.14 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 17 | 0.96 | 0.48 | 0.9 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 17 | 0.96 | 0.48 | 0.9 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 17 | 0.96 | 0.48 | 0.9 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 17 | 0.81 | 0.33 | 0.77 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 17 | 0.81 | 0.33 | 0.77 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 17 | 0.81 | 0.33 | 0.77 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 17 | 0.79 | 0.21 | 0.82 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 17 | 0.79 | 0.21 | 0.82 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 17 | 0.53 | 0.14 | 0.55 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 17 | 0.53 | 0.14 | 0.55 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 17 | 0.53 | 0.14 | 0.55 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:H | 17 | 0.53 | 0.14 | 0.51 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:H | 17 | 0.53 | 0.14 | 0.51 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:H | 17 | 0.53 | 0.14 | 0.51 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 17 | 0.52 | 0.22 | 0.53 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 17 | 0.52 | 0.22 | 0.53 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 17 | 0.52 | 0.22 | 0.53 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 17 | 0.51 | 0.21 | 0.53 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 17 | 0.51 | 0.21 | 0.53 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 17 | 0.51 | 0.21 | 0.53 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 17 | 0.51 | 0.21 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 17 | 0.51 | 0.21 | 0.53 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 17 | 0.51 | 0.21 | 0.53 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG21 | 17 | 0.35 | 0.16 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG22 | 17 | 0.35 | 0.16 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG23 | 17 | 0.35 | 0.16 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG21 | 17 | 0.35 | 0.16 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG22 | 17 | 0.35 | 0.16 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG23 | 17 | 0.35 | 0.16 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG21 | 17 | 0.35 | 0.16 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG22 | 17 | 0.35 | 0.16 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG23 | 17 | 0.35 | 0.16 | 0.35 |
| (1,1019) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:138:PHE:HB2 | 17 | 0.31 | 0.2 | 0.25 |
| (1,1393) | 1:A:48:THR:HA | 1:A:138:PHE:HB3 | 17 | 0.3 | 0.14 | 0.28 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG21 | 17 | 0.29 | 0.16 | 0.24 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG22 | 17 | 0.29 | 0.16 | 0.24 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG23 | 17 | 0.29 | 0.16 | 0.24 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG21 | 17 | 0.28 | 0.07 | 0.26 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG22 | 17 | 0.28 | 0.07 | 0.26 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG23 | 17 | 0.28 | 0.07 | 0.26 |
| (1,1075) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:H | 17 | 0.26 | 0.07 | 0.27 |
| (1,2743) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:75:GLY:HA3 | 17 | 0.24 | 0.05 | 0.26 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB1 | 17 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB2 | 17 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB3 | 17 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:HB2 | 17 | 0.17 | 0.03 | 0.17 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:HB2 | 17 | 0.17 | 0.03 | 0.17 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:HB2 | 17 | 0.17 | 0.03 | 0.17 |
| (1,2867) | 1:A:149:ASN:HB3 | 1:A:178:LYS:HE3 | 16 | 1.36 | 0.25 | 1.44 |
| (1,2165) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HA | 16 | 1.0 | 0.04 | 1.01 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB1 | 16 | 0.92 | 0.12 | 0.92 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB2 | 16 | 0.92 | 0.12 | 0.92 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB3 | 16 | 0.92 | 0.12 | 0.92 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:HA | 16 | 0.8 | 0.22 | 0.9 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:HA | 16 | 0.8 | 0.22 | 0.9 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:HA | 16 | 0.8 | 0.22 | 0.9 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:173:GLY:HA2 | 16 | 0.73 | 0.23 | 0.8 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:173:GLY:HA2 | 16 | 0.73 | 0.23 | 0.8 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:173:GLY:HA2 | 16 | 0.73 | 0.23 | 0.8 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HA | 16 | 0.46 | 0.13 | 0.5 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HA | 16 | 0.46 | 0.13 | 0.5 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HA | 16 | 0.46 | 0.13 | 0.5 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 16 | 0.46 | 0.35 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 16 | 0.46 | 0.35 | 0.34 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 16 | 0.46 | 0.35 | 0.34 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 16 | 0.42 | 0.28 | 0.31 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 16 | 0.42 | 0.28 | 0.31 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 16 | 0.42 | 0.28 | 0.31 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HA | 16 | 0.41 | 0.22 | 0.35 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HA | 16 | 0.41 | 0.22 | 0.35 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HA | 16 | 0.41 | 0.22 | 0.35 |
| (1,2987) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:66:ALA:H | 16 | 0.28 | 0.11 | 0.28 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE1 | 15 | 1.92 | 0.17 | 1.88 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE2 | 15 | 1.92 | 0.17 | 1.88 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE1 | 15 | 1.92 | 0.17 | 1.88 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE2 | 15 | 1.92 | 0.17 | 1.88 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE1 | 15 | 1.92 | 0.17 | 1.88 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE2 | 15 | 1.92 | 0.17 | 1.88 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD1 | 15 | 1.72 | 0.18 | 1.76 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD2 | 15 | 1.72 | 0.18 | 1.76 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD1 | 15 | 1.72 | 0.18 | 1.76 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD2 | 15 | 1.72 | 0.18 | 1.76 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD1 | 15 | 1.72 | 0.18 | 1.76 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD2 | 15 | 1.72 | 0.18 | 1.76 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HA | 15 | 1.56 | 0.24 | 1.56 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HA | 15 | 1.56 | 0.24 | 1.56 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HA | 15 | 1.56 | 0.24 | 1.56 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG21 | 15 | 1.55 | 0.16 | 1.56 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG22 | 15 | 1.55 | 0.16 | 1.56 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG23 | 15 | 1.55 | 0.16 | 1.56 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG21 | 15 | 1.55 | 0.16 | 1.56 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG22 | 15 | 1.55 | 0.16 | 1.56 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG23 | 15 | 1.55 | 0.16 | 1.56 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG21 | 15 | 1.55 | 0.16 | 1.56 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG22 | 15 | 1.55 | 0.16 | 1.56 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG23 | 15 | 1.55 | 0.16 | 1.56 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 15 | 1.28 | 0.16 | 1.27 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 15 | 1.28 | 0.16 | 1.27 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 15 | 1.28 | 0.16 | 1.27 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG11 | 15 | 1.26 | 0.1 | 1.23 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG12 | 15 | 1.26 | 0.1 | 1.23 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG13 | 15 | 1.26 | 0.1 | 1.23 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:H | 15 | 1.18 | 0.18 | 1.12 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:H | 15 | 1.18 | 0.18 | 1.12 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:H | 15 | 1.18 | 0.18 | 1.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:150:ALA:H | 15 | 1.18 | 0.16 | 1.24 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:150:ALA:H | 15 | 1.18 | 0.16 | 1.24 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:150:ALA:H | 15 | 1.18 | 0.16 | 1.24 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG11 | 15 | 1.17 | 0.02 | 1.17 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG12 | 15 | 1.17 | 0.02 | 1.17 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG13 | 15 | 1.17 | 0.02 | 1.17 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:134:GLN:HE22 | 15 | 1.15 | 0.42 | 1.22 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:134:GLN:HE22 | 15 | 1.15 | 0.42 | 1.22 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:134:GLN:HE22 | 15 | 1.15 | 0.42 | 1.22 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB1 | 15 | 0.95 | 0.29 | 0.87 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB2 | 15 | 0.95 | 0.29 | 0.87 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB3 | 15 | 0.95 | 0.29 | 0.87 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB1 | 15 | 0.95 | 0.29 | 0.87 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB2 | 15 | 0.95 | 0.29 | 0.87 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB3 | 15 | 0.95 | 0.29 | 0.87 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB1 | 15 | 0.95 | 0.29 | 0.87 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB2 | 15 | 0.95 | 0.29 | 0.87 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB3 | 15 | 0.95 | 0.29 | 0.87 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG11 | 15 | 0.94 | 0.06 | 0.94 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG12 | 15 | 0.94 | 0.06 | 0.94 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG13 | 15 | 0.94 | 0.06 | 0.94 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG21 | 15 | 0.91 | 0.21 | 0.94 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG22 | 15 | 0.91 | 0.21 | 0.94 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG23 | 15 | 0.91 | 0.21 | 0.94 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:149:ASN:HA | 15 | 0.82 | 0.2 | 0.73 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:149:ASN:HA | 15 | 0.82 | 0.2 | 0.73 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:149:ASN:HA | 15 | 0.82 | 0.2 | 0.73 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 15 | 0.81 | 0.22 | 0.8 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 15 | 0.81 | 0.22 | 0.8 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 15 | 0.81 | 0.22 | 0.8 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 15 | 0.76 | 0.02 | 0.77 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 15 | 0.76 | 0.02 | 0.77 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 15 | 0.76 | 0.02 | 0.77 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 15 | 0.76 | 0.42 | 0.71 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 15 | 0.76 | 0.42 | 0.71 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 15 | 0.76 | 0.42 | 0.71 |
| (1,2745) | 1:A:104:LEU:HB2 | 1:A:108:GLY:HA3 | 15 | 0.71 | 0.39 | 0.57 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:H | 15 | 0.58 | 0.28 | 0.64 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:H | 15 | 0.58 | 0.28 | 0.64 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:H | 15 | 0.58 | 0.28 | 0.64 |
| (1,3564) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HA | 15 | 0.56 | 0.17 | 0.66 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:102:GLN:H | 15 | 0.54 | 0.13 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:102:GLN:H | 15 | 0.54 | 0.13 | 0.54 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:102:GLN:H | 15 | 0.54 | 0.13 | 0.54 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 15 | 0.45 | 0.05 | 0.45 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 15 | 0.45 | 0.05 | 0.45 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 15 | 0.45 | 0.05 | 0.45 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 15 | 0.42 | 0.11 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 15 | 0.42 | 0.11 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 15 | 0.42 | 0.11 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 15 | 0.42 | 0.11 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 15 | 0.42 | 0.11 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 15 | 0.42 | 0.11 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 15 | 0.42 | 0.11 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 15 | 0.42 | 0.11 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 15 | 0.42 | 0.11 | 0.38 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 15 | 0.38 | 0.17 | 0.38 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 15 | 0.38 | 0.17 | 0.38 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 15 | 0.38 | 0.17 | 0.38 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 0.35 | 0.16 | 0.32 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 0.35 | 0.16 | 0.32 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 0.35 | 0.16 | 0.32 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG2 | 15 | 0.33 | 0.2 | 0.26 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG3 | 15 | 0.33 | 0.2 | 0.26 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 15 | 0.31 | 0.02 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 15 | 0.31 | 0.02 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 15 | 0.31 | 0.02 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 15 | 0.31 | 0.02 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 15 | 0.31 | 0.02 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 15 | 0.31 | 0.02 | 0.3 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 15 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 15 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 15 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HB | 15 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HB | 15 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HB | 15 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 15 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 15 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 15 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG21 | 15 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG22 | 15 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG23 | 15 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG21 | 1:A:82:HIS:HD2 | 15 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG22 | 1:A:82:HIS:HD2 | 15 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG23 | 1:A:82:HIS:HD2 | 15 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 1.45 | 0.6 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 1.45 | 0.6 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 1.45 | 0.6 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 1.45 | 0.6 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 1.45 | 0.6 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 1.45 | 0.6 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 1.45 | 0.6 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 1.45 | 0.6 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 1.45 | 0.6 | 1.5 |
| (1,1419) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:106:ARG:HA | 14 | 1.35 | 0.03 | 1.35 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:H | 14 | 1.07 | 0.4 | 1.21 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:H | 14 | 1.07 | 0.4 | 1.21 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:H | 14 | 1.07 | 0.4 | 1.21 |
| (1,331) | 1:A:150:ALA:H | 1:A:178:LYS:HE3 | 14 | 0.91 | 0.24 | 0.9 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 14 | 0.82 | 0.12 | 0.84 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 14 | 0.82 | 0.12 | 0.84 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 14 | 0.82 | 0.12 | 0.84 |
| (1,3242) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HB | 14 | 0.74 | 0.3 | 0.64 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:59:ASN:HB3 | 14 | 0.71 | 0.23 | 0.8 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:59:ASN:HB3 | 14 | 0.71 | 0.23 | 0.8 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:59:ASN:HB3 | 14 | 0.71 | 0.23 | 0.8 |
| (1,2435) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:105:ASP:HB2 | 14 | 0.43 | 0.06 | 0.42 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB3 | 14 | 0.38 | 0.22 | 0.33 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB3 | 14 | 0.38 | 0.22 | 0.33 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB3 | 14 | 0.38 | 0.22 | 0.33 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 14 | 0.36 | 0.1 | 0.35 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 14 | 0.36 | 0.1 | 0.35 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 14 | 0.36 | 0.1 | 0.35 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:H | 14 | 0.33 | 0.15 | 0.3 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:H | 14 | 0.33 | 0.15 | 0.3 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:H | 14 | 0.33 | 0.15 | 0.3 |
| (1,596) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:30:GLN:HG3 | 14 | 0.28 | 0.1 | 0.28 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 0.28 | 0.07 | 0.28 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 0.28 | 0.07 | 0.28 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 0.28 | 0.07 | 0.28 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 0.28 | 0.07 | 0.28 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 0.28 | 0.07 | 0.28 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 0.28 | 0.07 | 0.28 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 0.28 | 0.07 | 0.28 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 0.28 | 0.07 | 0.28 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 0.28 | 0.07 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD1 | 13 | 1.12 | 0.63 | 1.26 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD2 | 13 | 1.12 | 0.63 | 1.26 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD1 | 13 | 1.12 | 0.63 | 1.26 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD2 | 13 | 1.12 | 0.63 | 1.26 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD1 | 13 | 1.12 | 0.63 | 1.26 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD2 | 13 | 1.12 | 0.63 | 1.26 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:131:ILE:HG13 | 13 | 0.69 | 0.42 | 0.68 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:131:ILE:HG13 | 13 | 0.69 | 0.42 | 0.68 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:131:ILE:HG13 | 13 | 0.69 | 0.42 | 0.68 |
| (1,3273) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:159:GLN:HG2 | 13 | 0.5 | 0.31 | 0.39 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 13 | 0.45 | 0.09 | 0.47 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 13 | 0.45 | 0.09 | 0.47 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 13 | 0.45 | 0.09 | 0.47 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 13 | 0.44 | 0.26 | 0.35 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 13 | 0.44 | 0.26 | 0.35 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 13 | 0.44 | 0.26 | 0.35 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 13 | 0.44 | 0.26 | 0.35 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 13 | 0.44 | 0.26 | 0.35 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 13 | 0.44 | 0.26 | 0.35 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 13 | 0.44 | 0.26 | 0.35 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 13 | 0.44 | 0.26 | 0.35 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 13 | 0.44 | 0.26 | 0.35 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE21 | 13 | 0.4 | 0.2 | 0.38 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE21 | 13 | 0.4 | 0.2 | 0.38 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE21 | 13 | 0.4 | 0.2 | 0.38 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE22 | 13 | 0.4 | 0.2 | 0.38 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE22 | 13 | 0.4 | 0.2 | 0.38 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE22 | 13 | 0.4 | 0.2 | 0.38 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 13 | 0.34 | 0.17 | 0.32 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 13 | 0.34 | 0.17 | 0.32 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 13 | 0.34 | 0.17 | 0.32 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 13 | 0.34 | 0.17 | 0.32 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 13 | 0.34 | 0.17 | 0.32 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 13 | 0.34 | 0.17 | 0.32 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:H | 13 | 0.28 | 0.12 | 0.31 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:H | 13 | 0.28 | 0.12 | 0.31 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:H | 13 | 0.28 | 0.12 | 0.31 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:33:GLN:HB3 | 13 | 0.27 | 0.07 | 0.26 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:33:GLN:HB3 | 13 | 0.27 | 0.07 | 0.26 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:33:GLN:HB3 | 13 | 0.27 | 0.07 | 0.26 |
| (1,750) | 1:A:133:PHE:HB2 | 1:A:134:GLN:H | 13 | 0.26 | 0.09 | 0.24 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 13 | 0.19 | 0.05 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 13 | 0.19 | 0.05 | 0.18 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 13 | 0.19 | 0.05 | 0.18 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG21 | 13 | 0.15 | 0.05 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG22 | 13 | 0.15 | 0.05 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG23 | 13 | 0.15 | 0.05 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG21 | 13 | 0.15 | 0.05 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG22 | 13 | 0.15 | 0.05 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG23 | 13 | 0.15 | 0.05 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 13 | 0.15 | 0.05 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 13 | 0.15 | 0.05 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 13 | 0.15 | 0.05 | 0.14 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB1 | 13 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB2 | 13 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB3 | 13 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB1 | 13 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB2 | 13 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB3 | 13 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB1 | 13 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB2 | 13 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB3 | 13 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 2.29 | 0.2 | 2.3 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 2.29 | 0.2 | 2.3 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 2.29 | 0.2 | 2.3 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 12 | 2.01 | 0.25 | 1.97 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 12 | 2.01 | 0.25 | 1.97 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 12 | 2.01 | 0.25 | 1.97 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE1 | 12 | 1.82 | 0.19 | 1.86 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE2 | 12 | 1.82 | 0.19 | 1.86 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE1 | 12 | 1.82 | 0.19 | 1.86 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE2 | 12 | 1.82 | 0.19 | 1.86 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE1 | 12 | 1.82 | 0.19 | 1.86 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE2 | 12 | 1.82 | 0.19 | 1.86 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG21 | 12 | 1.72 | 0.44 | 1.67 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG22 | 12 | 1.72 | 0.44 | 1.67 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG23 | 12 | 1.72 | 0.44 | 1.67 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG21 | 12 | 1.46 | 0.45 | 1.38 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG22 | 12 | 1.46 | 0.45 | 1.38 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG23 | 12 | 1.46 | 0.45 | 1.38 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 1.41 | 0.25 | 1.42 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 1.41 | 0.25 | 1.42 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 1.41 | 0.25 | 1.42 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB2 | 12 | 1.23 | 0.31 | 1.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB2 | 12 | 1.23 | 0.31 | 1.23 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB2 | 12 | 1.23 | 0.31 | 1.23 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG11 | 12 | 1.21 | 0.31 | 1.22 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG12 | 12 | 1.21 | 0.31 | 1.22 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG13 | 12 | 1.21 | 0.31 | 1.22 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG11 | 12 | 1.08 | 0.59 | 1.18 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG12 | 12 | 1.08 | 0.59 | 1.18 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG13 | 12 | 1.08 | 0.59 | 1.18 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG21 | 12 | 1.05 | 0.36 | 1.01 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG22 | 12 | 1.05 | 0.36 | 1.01 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG23 | 12 | 1.05 | 0.36 | 1.01 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 12 | 1.03 | 0.16 | 1.04 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 12 | 1.03 | 0.16 | 1.04 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 12 | 1.03 | 0.16 | 1.04 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 12 | 1.03 | 0.16 | 1.04 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 12 | 1.03 | 0.16 | 1.04 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 12 | 1.03 | 0.16 | 1.04 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HA | 12 | 1.03 | 0.32 | 1.07 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HA | 12 | 1.03 | 0.32 | 1.07 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HA | 12 | 1.03 | 0.32 | 1.07 |
| (1,2864) | 1:A:89:GLN:HE21 | 1:A:178:LYS:HE3 | 12 | 0.92 | 0.43 | 0.99 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HB | 12 | 0.88 | 0.98 | 0.2 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HB | 12 | 0.88 | 0.98 | 0.2 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HB | 12 | 0.88 | 0.98 | 0.2 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB3 | 12 | 0.86 | 0.54 | 0.92 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB3 | 12 | 0.86 | 0.54 | 0.92 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB3 | 12 | 0.86 | 0.54 | 0.92 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:H | 12 | 0.66 | 0.13 | 0.72 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:H | 12 | 0.66 | 0.13 | 0.72 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:H | 12 | 0.66 | 0.13 | 0.72 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:28:VAL:H | 12 | 0.54 | 0.33 | 0.56 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:28:VAL:H | 12 | 0.54 | 0.33 | 0.56 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:28:VAL:H | 12 | 0.54 | 0.33 | 0.56 |
| (1,560) | 1:A:151:ASP:H | 1:A:151:ASP:HB2 | 12 | 0.42 | 0.06 | 0.44 |
| (1,2540) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:152:ALA:HA | 12 | 0.42 | 0.07 | 0.42 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB1 | 1:A:149:ASN:HD21 | 12 | 0.42 | 0.17 | 0.4 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB2 | 1:A:149:ASN:HD21 | 12 | 0.42 | 0.17 | 0.4 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB3 | 1:A:149:ASN:HD21 | 12 | 0.42 | 0.17 | 0.4 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 0.4 | 0.15 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 0.4 | 0.15 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 0.4 | 0.15 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 0.4 | 0.15 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 0.4 | 0.15 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 0.4 | 0.15 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 0.4 | 0.15 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 0.4 | 0.15 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 0.4 | 0.15 | 0.44 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG13 | 12 | 0.4 | 0.22 | 0.34 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG13 | 12 | 0.4 | 0.22 | 0.34 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG13 | 12 | 0.4 | 0.22 | 0.34 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 0.33 | 0.05 | 0.33 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 0.33 | 0.05 | 0.33 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 0.33 | 0.05 | 0.33 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:H | 12 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:H | 12 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:H | 12 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD21 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD22 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD23 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD21 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD22 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD23 | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB3 | 11 | 1.11 | 0.49 | 1.28 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB3 | 11 | 1.11 | 0.49 | 1.28 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB3 | 11 | 1.11 | 0.49 | 1.28 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 11 | 0.91 | 0.15 | 0.95 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 11 | 0.91 | 0.15 | 0.95 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 11 | 0.91 | 0.15 | 0.95 |
| (1,631) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:95:SER:H | 11 | 0.5 | 0.04 | 0.51 |
| (1,2677) | 1:A:28:VAL:HB | 1:A:173:GLY:HA2 | 11 | 0.49 | 0.24 | 0.5 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:HA | 11 | 0.48 | 0.22 | 0.41 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:HA | 11 | 0.48 | 0.22 | 0.41 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:HA | 11 | 0.48 | 0.22 | 0.41 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE1 | 11 | 0.43 | 0.18 | 0.47 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE2 | 11 | 0.43 | 0.18 | 0.47 |
| (1,2791) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:46:GLY:HA2 | 11 | 0.35 | 0.1 | 0.38 |
| (1,942) | 1:A:24:ASP:HB2 | 1:A:27:SER:H | 11 | 0.33 | 0.18 | 0.31 |
| (1,3486) | 1:A:78:ILE:HG12 | 1:A:79:ASP:HB3 | 11 | 0.31 | 0.1 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 11 | 0.3 | 0.14 | 0.28 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 11 | 0.3 | 0.14 | 0.28 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 11 | 0.3 | 0.14 | 0.28 |
| (1,2317) | 1:A:44:GLN:HA | 1:A:141:GLY:HA3 | 11 | 0.22 | 0.1 | 0.17 |
| (1,3137) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 11 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE1 | 11 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE2 | 11 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE1 | 11 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE2 | 11 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE1 | 11 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE2 | 11 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB1 | 11 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB2 | 11 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB3 | 11 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG21 | 1:A:176:HIS:HD2 | 11 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG22 | 1:A:176:HIS:HD2 | 11 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG23 | 1:A:176:HIS:HD2 | 11 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:183:ASN:HB3 | 11 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:183:ASN:HB3 | 11 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:183:ASN:HB3 | 11 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:H | 10 | 2.76 | 0.08 | 2.78 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:H | 10 | 2.76 | 0.08 | 2.78 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:H | 10 | 2.76 | 0.08 | 2.78 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HA | 10 | 2.18 | 0.1 | 2.2 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HA | 10 | 2.18 | 0.1 | 2.2 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HA | 10 | 2.18 | 0.1 | 2.2 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD1 | 10 | 1.76 | 0.11 | 1.81 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD2 | 10 | 1.76 | 0.11 | 1.81 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD1 | 10 | 1.76 | 0.11 | 1.81 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD2 | 10 | 1.76 | 0.11 | 1.81 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD1 | 10 | 1.76 | 0.11 | 1.81 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD2 | 10 | 1.76 | 0.11 | 1.81 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG11 | 10 | 1.76 | 0.57 | 1.86 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG12 | 10 | 1.76 | 0.57 | 1.86 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG13 | 10 | 1.76 | 0.57 | 1.86 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:155:LYS:H | 10 | 1.63 | 0.12 | 1.63 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:155:LYS:H | 10 | 1.63 | 0.12 | 1.63 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:155:LYS:H | 10 | 1.63 | 0.12 | 1.63 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG21 | 10 | 1.47 | 0.29 | 1.36 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG22 | 10 | 1.47 | 0.29 | 1.36 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG23 | 10 | 1.47 | 0.29 | 1.36 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD1 | 10 | 1.46 | 0.25 | 1.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD2 | 10 | 1.46 | 0.25 | 1.42 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD1 | 10 | 1.46 | 0.25 | 1.42 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD2 | 10 | 1.46 | 0.25 | 1.42 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD1 | 10 | 1.46 | 0.25 | 1.42 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD2 | 10 | 1.46 | 0.25 | 1.42 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:H | 10 | 1.45 | 0.21 | 1.44 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:H | 10 | 1.45 | 0.21 | 1.44 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:H | 10 | 1.45 | 0.21 | 1.44 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 10 | 1.28 | 0.06 | 1.27 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 10 | 1.28 | 0.06 | 1.27 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 10 | 1.28 | 0.06 | 1.27 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB2 | 10 | 1.26 | 0.11 | 1.26 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB3 | 10 | 1.26 | 0.11 | 1.26 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB2 | 10 | 1.26 | 0.11 | 1.26 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB3 | 10 | 1.26 | 0.11 | 1.26 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB2 | 10 | 1.26 | 0.11 | 1.26 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB3 | 10 | 1.26 | 0.11 | 1.26 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG11 | 10 | 1.06 | 0.64 | 0.74 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG12 | 10 | 1.06 | 0.64 | 0.74 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG13 | 10 | 1.06 | 0.64 | 0.74 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE1 | 10 | 1.04 | 0.07 | 1.04 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE2 | 10 | 1.04 | 0.07 | 1.04 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE1 | 10 | 1.04 | 0.07 | 1.04 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE2 | 10 | 1.04 | 0.07 | 1.04 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE1 | 10 | 1.04 | 0.07 | 1.04 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE2 | 10 | 1.04 | 0.07 | 1.04 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 10 | 1.02 | 0.24 | 1.02 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 10 | 1.02 | 0.24 | 1.02 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 10 | 1.02 | 0.24 | 1.02 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HZ | 10 | 1.02 | 0.17 | 1.02 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HZ | 10 | 1.02 | 0.17 | 1.02 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HZ | 10 | 1.02 | 0.17 | 1.02 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HD21 | 10 | 0.91 | 0.84 | 0.5 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HD21 | 10 | 0.91 | 0.84 | 0.5 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HD21 | 10 | 0.91 | 0.84 | 0.5 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 10 | 0.9 | 0.05 | 0.92 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 10 | 0.9 | 0.05 | 0.92 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 10 | 0.9 | 0.05 | 0.92 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG21 | 10 | 0.84 | 0.19 | 0.86 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG22 | 10 | 0.84 | 0.19 | 0.86 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG23 | 10 | 0.84 | 0.19 | 0.86 |
| (1,495) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:15:GLU:H | 10 | 0.84 | 0.17 | 0.83 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:72:ALA:H | 10 | 0.8 | 0.12 | 0.76 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:72:ALA:H | 10 | 0.8 | 0.12 | 0.76 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:72:ALA:H | 10 | 0.8 | 0.12 | 0.76 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG21 | 10 | 0.76 | 0.67 | 0.54 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG22 | 10 | 0.76 | 0.67 | 0.54 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG23 | 10 | 0.76 | 0.67 | 0.54 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG21 | 10 | 0.76 | 0.67 | 0.54 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG22 | 10 | 0.76 | 0.67 | 0.54 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG23 | 10 | 0.76 | 0.67 | 0.54 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG21 | 10 | 0.76 | 0.67 | 0.54 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG22 | 10 | 0.76 | 0.67 | 0.54 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG23 | 10 | 0.76 | 0.67 | 0.54 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 10 | 0.69 | 0.03 | 0.69 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 10 | 0.69 | 0.03 | 0.69 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 10 | 0.69 | 0.03 | 0.69 |
| (1,3969) | 1:A:11:HIS:HB2 | 1:A:11:HIS:HD2 | 10 | 0.68 | 0.07 | 0.68 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:ASN:H | 10 | 0.66 | 0.27 | 0.64 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:ASN:H | 10 | 0.66 | 0.27 | 0.64 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:ASN:H | 10 | 0.66 | 0.27 | 0.64 |
| (1,3934) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:138:PHE:HZ | 10 | 0.64 | 0.24 | 0.58 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB1 | 10 | 0.63 | 0.24 | 0.55 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB2 | 10 | 0.63 | 0.24 | 0.55 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB3 | 10 | 0.63 | 0.24 | 0.55 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG21 | 10 | 0.59 | 0.08 | 0.64 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG22 | 10 | 0.59 | 0.08 | 0.64 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG23 | 10 | 0.59 | 0.08 | 0.64 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG11 | 10 | 0.52 | 0.17 | 0.51 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG12 | 10 | 0.52 | 0.17 | 0.51 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG13 | 10 | 0.52 | 0.17 | 0.51 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG11 | 10 | 0.52 | 0.17 | 0.51 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG12 | 10 | 0.52 | 0.17 | 0.51 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG13 | 10 | 0.52 | 0.17 | 0.51 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:HA3 | 10 | 0.49 | 0.22 | 0.52 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:HA3 | 10 | 0.49 | 0.22 | 0.52 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:HA3 | 10 | 0.49 | 0.22 | 0.52 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG11 | 10 | 0.41 | 0.18 | 0.38 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG12 | 10 | 0.41 | 0.18 | 0.38 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG13 | 10 | 0.41 | 0.18 | 0.38 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG11 | 10 | 0.41 | 0.08 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG12 | 10 | 0.41 | 0.08 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG13 | 10 | 0.41 | 0.08 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG11 | 10 | 0.41 | 0.08 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG12 | 10 | 0.41 | 0.08 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG13 | 10 | 0.41 | 0.08 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG11 | 10 | 0.41 | 0.08 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG12 | 10 | 0.41 | 0.08 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG13 | 10 | 0.41 | 0.08 | 0.43 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 10 | 0.37 | 0.03 | 0.38 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 10 | 0.37 | 0.03 | 0.38 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 10 | 0.37 | 0.03 | 0.38 |
| (1,573) | 1:A:91:SER:HB2 | 1:A:93:ALA:H | 10 | 0.33 | 0.02 | 0.34 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 10 | 0.33 | 0.1 | 0.33 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 10 | 0.33 | 0.1 | 0.33 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 10 | 0.33 | 0.1 | 0.33 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:138:PHE:H | 10 | 0.27 | 0.06 | 0.29 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:H | 10 | 0.27 | 0.06 | 0.29 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:138:PHE:H | 10 | 0.27 | 0.06 | 0.29 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD3 | 10 | 0.26 | 0.07 | 0.27 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD3 | 10 | 0.26 | 0.07 | 0.27 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD3 | 10 | 0.26 | 0.07 | 0.27 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD2 | 10 | 0.26 | 0.07 | 0.27 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD2 | 10 | 0.26 | 0.07 | 0.27 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD2 | 10 | 0.26 | 0.07 | 0.27 |
| (1,365) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:138:PHE:H | 10 | 0.25 | 0.1 | 0.24 |
| (1,2923) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:62:ASP:H | 10 | 0.23 | 0.06 | 0.25 |
| (1,2030) | 1:A:159:GLN:HA | 1:A:159:GLN:HG3 | 10 | 0.19 | 0.05 | 0.19 |
| (1,3540) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 10 | 0.18 | 0.05 | 0.18 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG21 | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG22 | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG23 | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG21 | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG22 | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG23 | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG21 | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG22 | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG23 | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG21 | 1:A:65:VAL:H | 10 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG22 | 1:A:65:VAL:H | 10 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG23 | 1:A:65:VAL:H | 10 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG21 | 10 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG22 | 10 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG23 | 10 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:182:VAL:HB | 10 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:182:VAL:HB | 10 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:182:VAL:HB | 10 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HA | 9 | 1.99 | 0.21 | 2.02 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HA | 9 | 1.99 | 0.21 | 2.02 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HA | 9 | 1.99 | 0.21 | 2.02 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG11 | 9 | 1.76 | 0.85 | 1.85 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG12 | 9 | 1.76 | 0.85 | 1.85 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG13 | 9 | 1.76 | 0.85 | 1.85 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB3 | 9 | 1.44 | 0.28 | 1.51 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB3 | 9 | 1.44 | 0.28 | 1.51 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB3 | 9 | 1.44 | 0.28 | 1.51 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG11 | 9 | 1.09 | 0.11 | 1.14 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG12 | 9 | 1.09 | 0.11 | 1.14 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG13 | 9 | 1.09 | 0.11 | 1.14 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:H | 9 | 0.91 | 0.15 | 0.89 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:H | 9 | 0.91 | 0.15 | 0.89 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:H | 9 | 0.91 | 0.15 | 0.89 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG21 | 9 | 0.85 | 0.22 | 0.92 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG22 | 9 | 0.85 | 0.22 | 0.92 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG23 | 9 | 0.85 | 0.22 | 0.92 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB2 | 9 | 0.73 | 0.55 | 0.67 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB2 | 9 | 0.73 | 0.55 | 0.67 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB2 | 9 | 0.73 | 0.55 | 0.67 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB2 | 9 | 0.72 | 0.59 | 0.54 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB2 | 9 | 0.72 | 0.59 | 0.54 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB2 | 9 | 0.72 | 0.59 | 0.54 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:57:GLN:H | 9 | 0.68 | 0.45 | 0.69 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:57:GLN:H | 9 | 0.68 | 0.45 | 0.69 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:57:GLN:H | 9 | 0.68 | 0.45 | 0.69 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG21 | 9 | 0.58 | 0.03 | 0.59 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG22 | 9 | 0.58 | 0.03 | 0.59 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG23 | 9 | 0.58 | 0.03 | 0.59 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD2 | 9 | 0.54 | 0.14 | 0.53 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD3 | 9 | 0.54 | 0.14 | 0.53 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG11 | 9 | 0.36 | 0.08 | 0.34 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG12 | 9 | 0.36 | 0.08 | 0.34 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG13 | 9 | 0.36 | 0.08 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 9 | 0.32 | 0.22 | 0.25 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 9 | 0.32 | 0.22 | 0.25 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 9 | 0.32 | 0.22 | 0.25 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 9 | 0.32 | 0.22 | 0.25 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 9 | 0.32 | 0.22 | 0.25 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 9 | 0.32 | 0.22 | 0.25 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 9 | 0.32 | 0.22 | 0.25 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 9 | 0.32 | 0.22 | 0.25 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 9 | 0.32 | 0.22 | 0.25 |
| (1,1080) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:GLY:HA3 | 9 | 0.31 | 0.12 | 0.32 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:153:THR:H | 9 | 0.29 | 0.12 | 0.28 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:153:THR:H | 9 | 0.29 | 0.12 | 0.28 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:153:THR:H | 9 | 0.29 | 0.12 | 0.28 |
| (1,2857) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:111:LEU:HG | 9 | 0.28 | 0.09 | 0.34 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG21 | 9 | 0.26 | 0.1 | 0.32 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG22 | 9 | 0.26 | 0.1 | 0.32 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG23 | 9 | 0.26 | 0.1 | 0.32 |
| (1,764) | 1:A:91:SER:H | 1:A:91:SER:HB3 | 9 | 0.24 | 0.1 | 0.22 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG21 | 9 | 0.23 | 0.11 | 0.23 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG22 | 9 | 0.23 | 0.11 | 0.23 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG23 | 9 | 0.23 | 0.11 | 0.23 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG21 | 9 | 0.23 | 0.11 | 0.23 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG22 | 9 | 0.23 | 0.11 | 0.23 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG23 | 9 | 0.23 | 0.11 | 0.23 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG21 | 9 | 0.23 | 0.11 | 0.23 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG22 | 9 | 0.23 | 0.11 | 0.23 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG23 | 9 | 0.23 | 0.11 | 0.23 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG21 | 9 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG22 | 9 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG23 | 9 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE1 | 9 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE2 | 9 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HB | 8 | 1.18 | 0.3 | 1.12 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HB | 8 | 1.18 | 0.3 | 1.12 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HB | 8 | 1.18 | 0.3 | 1.12 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:54:PHE:H | 8 | 0.97 | 0.42 | 1.03 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:54:PHE:H | 8 | 0.97 | 0.42 | 1.03 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:54:PHE:H | 8 | 0.97 | 0.42 | 1.03 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG21 | 8 | 0.96 | 0.25 | 0.9 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG22 | 8 | 0.96 | 0.25 | 0.9 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG23 | 8 | 0.96 | 0.25 | 0.9 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG21 | 8 | 0.96 | 0.25 | 0.9 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG22 | 8 | 0.96 | 0.25 | 0.9 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG23 | 8 | 0.96 | 0.25 | 0.9 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG21 | 8 | 0.96 | 0.25 | 0.9 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG22 | 8 | 0.96 | 0.25 | 0.9 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG23 | 8 | 0.96 | 0.25 | 0.9 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 8 | 0.77 | 0.37 | 0.64 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 8 | 0.77 | 0.37 | 0.64 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 8 | 0.77 | 0.37 | 0.64 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE21 | 8 | 0.67 | 0.18 | 0.7 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE21 | 8 | 0.67 | 0.18 | 0.7 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE21 | 8 | 0.67 | 0.18 | 0.7 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD21 | 8 | 0.51 | 0.4 | 0.34 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD22 | 8 | 0.51 | 0.4 | 0.34 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD23 | 8 | 0.51 | 0.4 | 0.34 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD21 | 8 | 0.51 | 0.4 | 0.34 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD22 | 8 | 0.51 | 0.4 | 0.34 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD23 | 8 | 0.51 | 0.4 | 0.34 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD21 | 8 | 0.51 | 0.4 | 0.34 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD22 | 8 | 0.51 | 0.4 | 0.34 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD23 | 8 | 0.51 | 0.4 | 0.34 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 8 | 0.5 | 0.18 | 0.5 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 8 | 0.5 | 0.18 | 0.5 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 8 | 0.5 | 0.18 | 0.5 |
| (1,3778) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HB | 8 | 0.33 | 0.2 | 0.3 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:24:ASP:H | 8 | 0.3 | 0.11 | 0.29 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:24:ASP:H | 8 | 0.3 | 0.11 | 0.29 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:24:ASP:H | 8 | 0.3 | 0.11 | 0.29 |
| (1,2761) | 1:A:24:ASP:HB3 | 1:A:59:ASN:HD21 | 8 | 0.3 | 0.03 | 0.3 |
| (1,2726) | 1:A:8:GLY:HA2 | 1:A:9:THR:H | 8 | 0.22 | 0.06 | 0.2 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 8 | 0.19 | 0.08 | 0.15 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 8 | 0.19 | 0.08 | 0.15 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 8 | 0.19 | 0.08 | 0.15 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG11 | 8 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG12 | 8 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG13 | 8 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1467) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:LYS:HG2 | 7 | 0.69 | 0.24 | 0.73 |
| (1,2729) | 1:A:14:GLY:HA2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 7 | 0.54 | 0.12 | 0.55 |
| (1,158) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:113:LEU:H | 7 | 0.52 | 0.26 | 0.4 |
| (1,2941) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:13:LYS:HA | 7 | 0.5 | 0.2 | 0.53 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:59:ASN:H | 7 | 0.49 | 0.26 | 0.39 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:59:ASN:H | 7 | 0.49 | 0.26 | 0.39 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:59:ASN:H | 7 | 0.49 | 0.26 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3042) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:172:GLY:H | 7 | 0.47 | 0.18 | 0.47 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG21 | 7 | 0.44 | 0.25 | 0.36 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG22 | 7 | 0.44 | 0.25 | 0.36 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG23 | 7 | 0.44 | 0.25 | 0.36 |
| (1,2780) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA2 | 7 | 0.38 | 0.14 | 0.38 |
| (1,3283) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:159:GLN:HG3 | 7 | 0.36 | 0.19 | 0.42 |
| (1,2728) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:14:GLY:HA3 | 7 | 0.35 | 0.11 | 0.38 |
| (1,1106) | 1:A:74:LEU:HB3 | 1:A:115:GLY:H | 7 | 0.27 | 0.09 | 0.29 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 7 | 0.26 | 0.16 | 0.2 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 7 | 0.26 | 0.16 | 0.2 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 7 | 0.26 | 0.16 | 0.2 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 7 | 0.24 | 0.06 | 0.24 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 7 | 0.24 | 0.06 | 0.24 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 7 | 0.24 | 0.06 | 0.24 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD11 | 7 | 0.24 | 0.04 | 0.22 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD12 | 7 | 0.24 | 0.04 | 0.22 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD13 | 7 | 0.24 | 0.04 | 0.22 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 7 | 0.24 | 0.08 | 0.23 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 7 | 0.24 | 0.08 | 0.23 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 7 | 0.24 | 0.08 | 0.23 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB2 | 7 | 0.2 | 0.1 | 0.15 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB2 | 7 | 0.2 | 0.1 | 0.15 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB2 | 7 | 0.2 | 0.1 | 0.15 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB1 | 7 | 0.2 | 0.1 | 0.15 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB2 | 7 | 0.2 | 0.1 | 0.15 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB3 | 7 | 0.2 | 0.1 | 0.15 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB1 | 7 | 0.2 | 0.1 | 0.15 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB2 | 7 | 0.2 | 0.1 | 0.15 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB3 | 7 | 0.2 | 0.1 | 0.15 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB1 | 7 | 0.2 | 0.1 | 0.15 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB2 | 7 | 0.2 | 0.1 | 0.15 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB3 | 7 | 0.2 | 0.1 | 0.15 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:171:ASN:HA | 7 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:171:ASN:HA | 7 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:171:ASN:HA | 7 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:H | 7 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:H | 7 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:H | 7 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:177:PHE:HD1 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:177:PHE:HD2 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:177:PHE:HD1 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:177:PHE:HD2 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:177:PHE:HD1 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:177:PHE:HD2 | 7 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:73:PHE:HE1 | 7 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:73:PHE:HE2 | 7 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:73:PHE:HE1 | 7 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:73:PHE:HE2 | 7 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:73:PHE:HE1 | 7 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:73:PHE:HE2 | 7 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3947) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HZ | 7 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 6 | 0.81 | 0.34 | 0.88 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 6 | 0.81 | 0.34 | 0.88 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 6 | 0.81 | 0.34 | 0.88 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 6 | 0.81 | 0.34 | 0.88 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 6 | 0.81 | 0.34 | 0.88 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 6 | 0.81 | 0.34 | 0.88 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 6 | 0.81 | 0.34 | 0.88 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 6 | 0.81 | 0.34 | 0.88 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 6 | 0.81 | 0.34 | 0.88 |
| (1,1094) | 1:A:157:GLN:HB2 | 1:A:159:GLN:HE21 | 6 | 0.76 | 0.34 | 0.8 |
| (1,2846) | 1:A:54:PHE:HA | 1:A:55:ASN:HB3 | 6 | 0.66 | 0.15 | 0.61 |
| (1,1720) | 1:A:24:ASP:HA | 1:A:59:ASN:HB2 | 6 | 0.6 | 0.31 | 0.57 |
| (1,3527) | 1:A:176:HIS:HB2 | 1:A:178:LYS:HE2 | 6 | 0.52 | 0.26 | 0.53 |
| (1,498) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:170:VAL:H | 6 | 0.49 | 0.17 | 0.48 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 6 | 0.41 | 0.25 | 0.32 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 6 | 0.41 | 0.25 | 0.32 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 6 | 0.41 | 0.25 | 0.32 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 6 | 0.4 | 0.17 | 0.43 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 6 | 0.4 | 0.17 | 0.43 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 6 | 0.4 | 0.17 | 0.43 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG21 | 6 | 0.37 | 0.41 | 0.16 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG22 | 6 | 0.37 | 0.41 | 0.16 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG23 | 6 | 0.37 | 0.41 | 0.16 |
| (1,3469) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:112:THR:HA | 6 | 0.32 | 0.19 | 0.26 |
| (1,3219) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:180:GLU:HB2 | 6 | 0.29 | 0.15 | 0.28 |
| (1,3219) | 1:A:36:GLN:HG2 | 1:A:180:GLU:HB2 | 6 | 0.29 | 0.15 | 0.28 |
| (1,762) | 1:A:90:SER:HB3 | 1:A:91:SER:H | 6 | 0.26 | 0.07 | 0.26 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB1 | 6 | 0.19 | 0.06 | 0.21 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB2 | 6 | 0.19 | 0.06 | 0.21 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB3 | 6 | 0.19 | 0.06 | 0.21 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB1 | 6 | 0.19 | 0.06 | 0.21 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB2 | 6 | 0.19 | 0.06 | 0.21 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB3 | 6 | 0.19 | 0.06 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB1 | 6 | 0.19 | 0.06 | 0.21 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB2 | 6 | 0.19 | 0.06 | 0.21 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB3 | 6 | 0.19 | 0.06 | 0.21 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:174:THR:H | 6 | 0.18 | 0.06 | 0.15 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:174:THR:H | 6 | 0.18 | 0.06 | 0.15 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:174:THR:H | 6 | 0.18 | 0.06 | 0.15 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:145:PRO:HG2 | 6 | 0.17 | 0.06 | 0.15 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:145:PRO:HG2 | 6 | 0.17 | 0.06 | 0.15 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:145:PRO:HG2 | 6 | 0.17 | 0.06 | 0.15 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD11 | 6 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD12 | 6 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD13 | 6 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD11 | 6 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD12 | 6 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD13 | 6 | 0.11 | 0.01 | 0.11 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB1 | 6 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB2 | 6 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB3 | 6 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:145:PRO:HB2 | 6 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:145:PRO:HB2 | 6 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:145:PRO:HB2 | 6 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:68:LYS:HB3 | 6 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 6 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:68:LYS:HB3 | 6 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:111:LEU:HD11 | 5 | 1.95 | 0.19 | 1.99 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:111:LEU:HD12 | 5 | 1.95 | 0.19 | 1.99 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:111:LEU:HD13 | 5 | 1.95 | 0.19 | 1.99 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:111:LEU:HD11 | 5 | 1.95 | 0.19 | 1.99 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:111:LEU:HD12 | 5 | 1.95 | 0.19 | 1.99 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:111:LEU:HD13 | 5 | 1.95 | 0.19 | 1.99 |
| (1,2373) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HA | 5 | 1.9 | 0.34 | 1.9 |
| (1,2373) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HA | 5 | 1.9 | 0.34 | 1.9 |
| (1,2373) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HA | 5 | 1.9 | 0.34 | 1.9 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 5 | 1.82 | 0.16 | 1.84 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 5 | 1.82 | 0.16 | 1.84 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 5 | 1.82 | 0.16 | 1.84 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 5 | 1.82 | 0.16 | 1.84 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 5 | 1.82 | 0.16 | 1.84 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 5 | 1.82 | 0.16 | 1.84 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:111:LEU:HD11 | 5 | 1.75 | 0.23 | 1.74 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:111:LEU:HD12 | 5 | 1.75 | 0.23 | 1.74 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:111:LEU:HD13 | 5 | 1.75 | 0.23 | 1.74 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:111:LEU:HD11 | 5 | 1.75 | 0.23 | 1.74 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:111:LEU:HD12 | 5 | 1.75 | 0.23 | 1.74 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:111:LEU:HD13 | 5 | 1.75 | 0.23 | 1.74 |
| (1,708) | 1:A:66:ALA:H | 1:A:124:LEU:HD11 | 5 | 1.69 | 0.2 | 1.72 |
| (1,708) | 1:A:66:ALA:H | 1:A:124:LEU:HD12 | 5 | 1.69 | 0.2 | 1.72 |
| (1,708) | 1:A:66:ALA:H | 1:A:124:LEU:HD13 | 5 | 1.69 | 0.2 | 1.72 |
| (1,732) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:130:THR:H | 5 | 1.51 | 0.49 | 1.55 |
| (1,732) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:130:THR:H | 5 | 1.51 | 0.49 | 1.55 |
| (1,732) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:130:THR:H | 5 | 1.51 | 0.49 | 1.55 |
| (1,1939) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HB3 | 5 | 1.43 | 0.57 | 1.75 |
| (1,1939) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HB3 | 5 | 1.43 | 0.57 | 1.75 |
| (1,1939) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HB3 | 5 | 1.43 | 0.57 | 1.75 |
| (1,135) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:H | 5 | 1.31 | 0.36 | 1.24 |
| (1,135) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:H | 5 | 1.31 | 0.36 | 1.24 |
| (1,135) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:H | 5 | 1.31 | 0.36 | 1.24 |
| (1,1156) | 1:A:67:SER:H | 1:A:124:LEU:HD11 | 5 | 1.16 | 0.43 | 0.98 |
| (1,1156) | 1:A:67:SER:H | 1:A:124:LEU:HD12 | 5 | 1.16 | 0.43 | 0.98 |
| (1,1156) | 1:A:67:SER:H | 1:A:124:LEU:HD13 | 5 | 1.16 | 0.43 | 0.98 |
| (1,1585) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:112:THR:H | 5 | 1.05 | 0.1 | 1.1 |
| (1,1585) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:112:THR:H | 5 | 1.05 | 0.1 | 1.1 |
| (1,1585) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:112:THR:H | 5 | 1.05 | 0.1 | 1.1 |
| (1,1975) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HB2 | 5 | 0.97 | 0.37 | 1.07 |
| (1,1975) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HB2 | 5 | 0.97 | 0.37 | 1.07 |
| (1,1975) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HB2 | 5 | 0.97 | 0.37 | 1.07 |
| (1,3512) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:120:SER:HB3 | 5 | 0.97 | 0.14 | 0.99 |
| (1,3512) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:120:SER:HB3 | 5 | 0.97 | 0.14 | 0.99 |
| (1,3512) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:120:SER:HB3 | 5 | 0.97 | 0.14 | 0.99 |
| (1,3072) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:130:THR:HB | 5 | 0.96 | 0.21 | 0.96 |
| (1,1323) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:118:PHE:HA | 5 | 0.9 | 0.29 | 0.93 |
| (1,1323) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:118:PHE:HA | 5 | 0.9 | 0.29 | 0.93 |
| (1,1323) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:118:PHE:HA | 5 | 0.9 | 0.29 | 0.93 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HE1 | 5 | 0.83 | 0.26 | 0.91 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HE2 | 5 | 0.83 | 0.26 | 0.91 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HE1 | 5 | 0.83 | 0.26 | 0.91 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HE2 | 5 | 0.83 | 0.26 | 0.91 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HE1 | 5 | 0.83 | 0.26 | 0.91 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HE2 | 5 | 0.83 | 0.26 | 0.91 |
| (1,1588) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:119:SER:HA | 5 | 0.76 | 0.21 | 0.71 |
| (1,1588) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:119:SER:HA | 5 | 0.76 | 0.21 | 0.71 |
| (1,1588) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:119:SER:HA | 5 | 0.76 | 0.21 | 0.71 |
| (1,3505) | 1:A:106:ARG:HB2 | 1:A:132:PRO:HG2 | 5 | 0.73 | 0.4 | 0.67 |
| (1,3505) | 1:A:106:ARG:HB2 | 1:A:132:PRO:HG3 | 5 | 0.73 | 0.4 | 0.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1826) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:90:SER:HB2 | 5 | 0.72 | 0.36 | 0.95 |
| (1,1310) | 1:A:67:SER:HA | 1:A:124:LEU:HD11 | 5 | 0.67 | 0.32 | 0.7 |
| (1,1310) | 1:A:67:SER:HA | 1:A:124:LEU:HD12 | 5 | 0.67 | 0.32 | 0.7 |
| (1,1310) | 1:A:67:SER:HA | 1:A:124:LEU:HD13 | 5 | 0.67 | 0.32 | 0.7 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 5 | 0.65 | 0.23 | 0.67 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 5 | 0.65 | 0.23 | 0.67 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 5 | 0.65 | 0.23 | 0.67 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 5 | 0.65 | 0.23 | 0.67 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 5 | 0.65 | 0.23 | 0.67 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 5 | 0.65 | 0.23 | 0.67 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 5 | 0.65 | 0.23 | 0.67 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 5 | 0.65 | 0.23 | 0.67 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 5 | 0.65 | 0.23 | 0.67 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:124:LEU:HD11 | 5 | 0.59 | 0.21 | 0.61 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:124:LEU:HD12 | 5 | 0.59 | 0.21 | 0.61 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:124:LEU:HD13 | 5 | 0.59 | 0.21 | 0.61 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:124:LEU:HD11 | 5 | 0.59 | 0.21 | 0.61 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:124:LEU:HD12 | 5 | 0.59 | 0.21 | 0.61 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:124:LEU:HD13 | 5 | 0.59 | 0.21 | 0.61 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:124:LEU:HD11 | 5 | 0.59 | 0.21 | 0.61 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:124:LEU:HD12 | 5 | 0.59 | 0.21 | 0.61 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:124:LEU:HD13 | 5 | 0.59 | 0.21 | 0.61 |
| (1,420) | 1:A:73:PHE:H | 1:A:111:LEU:HD11 | 5 | 0.57 | 0.2 | 0.47 |
| (1,420) | 1:A:73:PHE:H | 1:A:111:LEU:HD12 | 5 | 0.57 | 0.2 | 0.47 |
| (1,420) | 1:A:73:PHE:H | 1:A:111:LEU:HD13 | 5 | 0.57 | 0.2 | 0.47 |
| (1,2576) | 1:A:59:ASN:HA | 1:A:129:ASN:HD21 | 5 | 0.56 | 0.24 | 0.53 |
| (1,841) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:84:ASN:HD22 | 5 | 0.53 | 0.09 | 0.55 |
| (1,1589) | 1:A:111:LEU:HA | 1:A:111:LEU:HD21 | 5 | 0.53 | 0.12 | 0.53 |
| (1,1589) | 1:A:111:LEU:HA | 1:A:111:LEU:HD22 | 5 | 0.53 | 0.12 | 0.53 |
| (1,1589) | 1:A:111:LEU:HA | 1:A:111:LEU:HD23 | 5 | 0.53 | 0.12 | 0.53 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:111:LEU:HD11 | 5 | 0.49 | 0.08 | 0.43 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:111:LEU:HD12 | 5 | 0.49 | 0.08 | 0.43 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:111:LEU:HD13 | 5 | 0.49 | 0.08 | 0.43 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:111:LEU:HD11 | 5 | 0.49 | 0.08 | 0.43 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:111:LEU:HD12 | 5 | 0.49 | 0.08 | 0.43 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:111:LEU:HD13 | 5 | 0.49 | 0.08 | 0.43 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:111:LEU:HD11 | 5 | 0.49 | 0.08 | 0.43 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:111:LEU:HD12 | 5 | 0.49 | 0.08 | 0.43 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:111:LEU:HD13 | 5 | 0.49 | 0.08 | 0.43 |
| (1,1583) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:119:SER:H | 5 | 0.48 | 0.11 | 0.55 |
| (1,1583) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:119:SER:H | 5 | 0.48 | 0.11 | 0.55 |
| (1,1583) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:119:SER:H | 5 | 0.48 | 0.11 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG11 | 5 | 0.47 | 0.4 | 0.41 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG12 | 5 | 0.47 | 0.4 | 0.41 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG13 | 5 | 0.47 | 0.4 | 0.41 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG21 | 5 | 0.47 | 0.4 | 0.41 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG22 | 5 | 0.47 | 0.4 | 0.41 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG23 | 5 | 0.47 | 0.4 | 0.41 |
| (1,2419) | 1:A:129:ASN:HA | 1:A:129:ASN:HD22 | 5 | 0.38 | 0.07 | 0.39 |
| (1,56) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:131:ILE:H | 5 | 0.35 | 0.1 | 0.41 |
| (1,1697) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:72:ALA:HA | 5 | 0.35 | 0.16 | 0.42 |
| (1,1697) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:72:ALA:HA | 5 | 0.35 | 0.16 | 0.42 |
| (1,1697) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:72:ALA:HA | 5 | 0.35 | 0.16 | 0.42 |
| (1,2398) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:110:ALA:HB1 | 5 | 0.31 | 0.09 | 0.36 |
| (1,2398) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:110:ALA:HB2 | 5 | 0.31 | 0.09 | 0.36 |
| (1,2398) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:110:ALA:HB3 | 5 | 0.31 | 0.09 | 0.36 |
| (1,2352) | 1:A:96:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 0.29 | 0.11 | 0.3 |
| (1,2352) | 1:A:96:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 0.29 | 0.11 | 0.3 |
| (1,2352) | 1:A:96:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 0.29 | 0.11 | 0.3 |
| (1,927) | 1:A:79:ASP:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 5 | 0.27 | 0.1 | 0.3 |
| (1,927) | 1:A:79:ASP:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 5 | 0.27 | 0.1 | 0.3 |
| (1,927) | 1:A:79:ASP:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 5 | 0.27 | 0.1 | 0.3 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 5 | 0.26 | 0.08 | 0.24 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 5 | 0.26 | 0.08 | 0.24 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 5 | 0.26 | 0.08 | 0.24 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 5 | 0.26 | 0.08 | 0.24 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 5 | 0.26 | 0.08 | 0.24 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 5 | 0.26 | 0.08 | 0.24 |
| (1,1215) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 5 | 0.25 | 0.09 | 0.26 |
| (1,1215) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 5 | 0.25 | 0.09 | 0.26 |
| (1,1215) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 5 | 0.25 | 0.09 | 0.26 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 5 | 0.21 | 0.1 | 0.2 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 5 | 0.21 | 0.1 | 0.2 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 5 | 0.21 | 0.1 | 0.2 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 5 | 0.21 | 0.1 | 0.2 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 5 | 0.21 | 0.1 | 0.2 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 5 | 0.21 | 0.1 | 0.2 |
| (1,2414) | 1:A:36:GLN:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 5 | 0.18 | 0.07 | 0.14 |
| (1,2414) | 1:A:36:GLN:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 5 | 0.18 | 0.07 | 0.14 |
| (1,2414) | 1:A:36:GLN:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 5 | 0.18 | 0.07 | 0.14 |
| (1,3584) | 1:A:107:THR:HA | 1:A:107:THR:HG21 | 5 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,3584) | 1:A:107:THR:HA | 1:A:107:THR:HG22 | 5 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,3584) | 1:A:107:THR:HA | 1:A:107:THR:HG23 | 5 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,844) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:64:ASN:HD22 | 5 | 0.12 | 0.02 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3986) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:137:TYR:HE1 | 5 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,3986) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:137:TYR:HE2 | 5 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG21 | 1:A:124:LEU:HD21 | 4 | 1.26 | 0.43 | 1.18 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG21 | 1:A:124:LEU:HD22 | 4 | 1.26 | 0.43 | 1.18 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG21 | 1:A:124:LEU:HD23 | 4 | 1.26 | 0.43 | 1.18 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG22 | 1:A:124:LEU:HD21 | 4 | 1.26 | 0.43 | 1.18 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG22 | 1:A:124:LEU:HD22 | 4 | 1.26 | 0.43 | 1.18 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG22 | 1:A:124:LEU:HD23 | 4 | 1.26 | 0.43 | 1.18 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG23 | 1:A:124:LEU:HD21 | 4 | 1.26 | 0.43 | 1.18 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG23 | 1:A:124:LEU:HD22 | 4 | 1.26 | 0.43 | 1.18 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG23 | 1:A:124:LEU:HD23 | 4 | 1.26 | 0.43 | 1.18 |
| (1,3536) | 1:A:122:THR:HA | 1:A:124:LEU:HD21 | 4 | 0.94 | 0.47 | 0.92 |
| (1,3536) | 1:A:122:THR:HA | 1:A:124:LEU:HD22 | 4 | 0.94 | 0.47 | 0.92 |
| (1,3536) | 1:A:122:THR:HA | 1:A:124:LEU:HD23 | 4 | 0.94 | 0.47 | 0.92 |
| (1,1312) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:124:LEU:HD11 | 4 | 0.82 | 0.36 | 0.73 |
| (1,1312) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:124:LEU:HD12 | 4 | 0.82 | 0.36 | 0.73 |
| (1,1312) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:124:LEU:HD13 | 4 | 0.82 | 0.36 | 0.73 |
| (1,957) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:171:ASN:HD21 | 4 | 0.78 | 0.44 | 0.78 |
| (1,3056) | 1:A:69:ALA:H | 1:A:121:GLU:HG2 | 4 | 0.78 | 0.22 | 0.76 |
| (1,1609) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:124:LEU:HD11 | 4 | 0.76 | 0.41 | 0.8 |
| (1,1609) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:124:LEU:HD12 | 4 | 0.76 | 0.41 | 0.8 |
| (1,1609) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:124:LEU:HD13 | 4 | 0.76 | 0.41 | 0.8 |
| (1,3775) | 1:A:106:ARG:HG3 | 1:A:120:SER:HB2 | 4 | 0.69 | 0.38 | 0.68 |
| (1,2899) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:121:GLU:HG2 | 4 | 0.62 | 0.3 | 0.67 |
| (1,2899) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:121:GLU:HG2 | 4 | 0.62 | 0.3 | 0.67 |
| (1,2105) | 1:A:9:THR:HA | 1:A:10:VAL:HG21 | 4 | 0.51 | 0.02 | 0.5 |
| (1,2105) | 1:A:9:THR:HA | 1:A:10:VAL:HG22 | 4 | 0.51 | 0.02 | 0.5 |
| (1,2105) | 1:A:9:THR:HA | 1:A:10:VAL:HG23 | 4 | 0.51 | 0.02 | 0.5 |
| (1,2851) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:130:THR:HA | 4 | 0.48 | 0.35 | 0.46 |
| (1,2860) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:119:SER:HB3 | 4 | 0.47 | 0.22 | 0.51 |
| (1,2804) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HB3 | 4 | 0.44 | 0.16 | 0.48 |
| (1,1595) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:120:SER:H | 4 | 0.44 | 0.18 | 0.44 |
| (1,1595) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:120:SER:H | 4 | 0.44 | 0.18 | 0.44 |
| (1,1595) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:120:SER:H | 4 | 0.44 | 0.18 | 0.44 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:34:LEU:HD11 | 4 | 0.42 | 0.16 | 0.44 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:34:LEU:HD12 | 4 | 0.42 | 0.16 | 0.44 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:34:LEU:HD13 | 4 | 0.42 | 0.16 | 0.44 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:34:LEU:HD11 | 4 | 0.42 | 0.16 | 0.44 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:34:LEU:HD12 | 4 | 0.42 | 0.16 | 0.44 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:34:LEU:HD13 | 4 | 0.42 | 0.16 | 0.44 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:34:LEU:HD11 | 4 | 0.42 | 0.16 | 0.44 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:34:LEU:HD12 | 4 | 0.42 | 0.16 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:34:LEU:HD13 | 4 | 0.42 | 0.16 | 0.44 |
| (1,62) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:27:SER:HB3 | 4 | 0.38 | 0.31 | 0.26 |
| (1,229) | 1:A:165:GLY:HA2 | 1:A:166:ALA:H | 4 | 0.38 | 0.05 | 0.38 |
| (1,985) | 1:A:61:CYS:HB3 | 1:A:127:GLY:H | 4 | 0.36 | 0.06 | 0.36 |
| (1,2572) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:129:ASN:HD22 | 4 | 0.36 | 0.19 | 0.37 |
| (1,1974) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:124:LEU:HD21 | 4 | 0.34 | 0.18 | 0.33 |
| (1,1974) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:124:LEU:HD22 | 4 | 0.34 | 0.18 | 0.33 |
| (1,1974) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:124:LEU:HD23 | 4 | 0.34 | 0.18 | 0.33 |
| (1,1971) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:125:ASN:H | 4 | 0.33 | 0.13 | 0.37 |
| (1,1971) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:125:ASN:H | 4 | 0.33 | 0.13 | 0.37 |
| (1,1971) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:125:ASN:H | 4 | 0.33 | 0.13 | 0.37 |
| (1,3398) | 1:A:28:VAL:HA | 1:A:173:GLY:HA2 | 4 | 0.33 | 0.15 | 0.34 |
| (1,1316) | 1:A:27:SER:HA | 1:A:30:GLN:HG3 | 4 | 0.32 | 0.11 | 0.32 |
| (1,737) | 1:A:106:ARG:H | 1:A:106:ARG:HB2 | 4 | 0.28 | 0.03 | 0.28 |
| (1,2924) | 1:A:59:ASN:HB2 | 1:A:128:THR:HA | 4 | 0.26 | 0.11 | 0.24 |
| (1,494) | 1:A:14:GLY:HA2 | 1:A:15:GLU:H | 4 | 0.24 | 0.09 | 0.23 |
| (1,686) | 1:A:115:GLY:HA3 | 1:A:117:THR:H | 4 | 0.24 | 0.1 | 0.24 |
| (1,1238) | 1:A:35:GLY:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 4 | 0.24 | 0.15 | 0.17 |
| (1,1238) | 1:A:35:GLY:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 4 | 0.24 | 0.15 | 0.17 |
| (1,1238) | 1:A:35:GLY:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 4 | 0.24 | 0.15 | 0.17 |
| (1,2884) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:155:LYS:HE3 | 4 | 0.24 | 0.07 | 0.28 |
| (1,2884) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:155:LYS:HE3 | 4 | 0.24 | 0.07 | 0.28 |
| (1,2884) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:155:LYS:HE3 | 4 | 0.24 | 0.07 | 0.28 |
| (1,1763) | 1:A:152:ALA:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 4 | 0.23 | 0.1 | 0.18 |
| (1,1763) | 1:A:152:ALA:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 4 | 0.23 | 0.1 | 0.18 |
| (1,1763) | 1:A:152:ALA:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 4 | 0.23 | 0.1 | 0.18 |
| (1,2327) | 1:A:170:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.15 |
| (1,2327) | 1:A:170:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.15 |
| (1,2327) | 1:A:170:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.15 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:74:LEU:HD21 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:74:LEU:HD22 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:74:LEU:HD23 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:74:LEU:HD21 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:74:LEU:HD22 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:74:LEU:HD23 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG11 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG12 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG13 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG21 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG22 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG23 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB1 | 1:A:169:THR:HG21 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB1 | 1:A:169:THR:HG22 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB1 | 1:A:169:THR:HG23 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB2 | 1:A:169:THR:HG21 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB2 | 1:A:169:THR:HG22 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB2 | 1:A:169:THR:HG23 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG11 | 1:A:38:ARG:HD2 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG11 | 1:A:38:ARG:HD3 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG12 | 1:A:38:ARG:HD2 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG12 | 1:A:38:ARG:HD3 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG13 | 1:A:38:ARG:HD2 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG13 | 1:A:38:ARG:HD3 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG21 | 1:A:38:ARG:HD2 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG21 | 1:A:38:ARG:HD3 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG22 | 1:A:38:ARG:HD2 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG22 | 1:A:38:ARG:HD3 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG23 | 1:A:38:ARG:HD2 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG23 | 1:A:38:ARG:HD3 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2208) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:51:ALA:HB1 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2208) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:51:ALA:HB2 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2208) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:51:ALA:HB3 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2023) | 1:A:68:LYS:HA | 1:A:124:LEU:HG | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2624) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:72:ALA:HA | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2624) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:72:ALA:HA | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,2624) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:72:ALA:HA | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,3497) | 1:A:106:ARG:HB2 | 1:A:132:PRO:HD2 | 3 | 0.84 | 0.41 | 0.57 |
| (1,3518) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:133:PHE:HE1 | 3 | 0.8 | 0.41 | 0.61 |
| (1,3518) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:133:PHE:HE2 | 3 | 0.8 | 0.41 | 0.61 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:156:VAL:HG21 | 3 | 0.77 | 0.39 | 0.92 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:156:VAL:HG22 | 3 | 0.77 | 0.39 | 0.92 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:156:VAL:HG23 | 3 | 0.77 | 0.39 | 0.92 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:156:VAL:HG21 | 3 | 0.77 | 0.39 | 0.92 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:156:VAL:HG22 | 3 | 0.77 | 0.39 | 0.92 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:156:VAL:HG23 | 3 | 0.77 | 0.39 | 0.92 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:156:VAL:HG21 | 3 | 0.77 | 0.39 | 0.92 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:156:VAL:HG22 | 3 | 0.77 | 0.39 | 0.92 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:156:VAL:HG23 | 3 | 0.77 | 0.39 | 0.92 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3483) | 1:A:68:LYS:HD3 | 1:A:121:GLU:HG2 | 3 | 0.75 | 0.25 | 0.72 |
| (1,387) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:H | 3 | 0.72 | 0.3 | 0.56 |
| (1,387) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:H | 3 | 0.72 | 0.3 | 0.56 |
| (1,387) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:H | 3 | 0.72 | 0.3 | 0.56 |
| (1,502) | 1:A:16:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:H | 3 | 0.69 | 0.21 | 0.83 |
| (1,502) | 1:A:16:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:H | 3 | 0.69 | 0.21 | 0.83 |
| (1,502) | 1:A:16:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:H | 3 | 0.69 | 0.21 | 0.83 |
| (1,1297) | 1:A:120:SER:HA | 1:A:121:GLU:HG3 | 3 | 0.61 | 0.27 | 0.76 |
| (1,3323) | 1:A:119:SER:HB3 | 1:A:120:SER:HB2 | 3 | 0.61 | 0.33 | 0.7 |
| (1,262) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 3 | 0.6 | 0.59 | 0.26 |
| (1,262) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 3 | 0.6 | 0.59 | 0.26 |
| (1,262) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 3 | 0.6 | 0.59 | 0.26 |
| (1,3513) | 1:A:106:ARG:HG3 | 1:A:120:SER:HB3 | 3 | 0.58 | 0.28 | 0.44 |
| (1,2813) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:124:LEU:HD21 | 3 | 0.56 | 0.23 | 0.63 |
| (1,2813) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:124:LEU:HD22 | 3 | 0.56 | 0.23 | 0.63 |
| (1,2813) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:124:LEU:HD23 | 3 | 0.56 | 0.23 | 0.63 |
| (1,2881) | 1:A:155:LYS:HE3 | 1:A:171:ASN:HD22 | 3 | 0.51 | 0.04 | 0.49 |
| (1,293) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:65:VAL:HG11 | 3 | 0.5 | 0.23 | 0.64 |
| (1,293) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:65:VAL:HG12 | 3 | 0.5 | 0.23 | 0.64 |
| (1,293) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:65:VAL:HG13 | 3 | 0.5 | 0.23 | 0.64 |
| (1,3162) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HB3 | 3 | 0.5 | 0.3 | 0.35 |
| (1,2858) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:29:ASP:HB3 | 3 | 0.47 | 0.43 | 0.19 |
| (1,1373) | 1:A:104:LEU:H | 1:A:104:LEU:HD21 | 3 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (1,1373) | 1:A:104:LEU:H | 1:A:104:LEU:HD22 | 3 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (1,1373) | 1:A:104:LEU:H | 1:A:104:LEU:HD23 | 3 | 0.4 | 0.07 | 0.38 |
| (1,1745) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 3 | 0.39 | 0.29 | 0.28 |
| (1,1745) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 3 | 0.39 | 0.29 | 0.28 |
| (1,1745) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 3 | 0.39 | 0.29 | 0.28 |
| (1,1833) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:59:ASN:HD22 | 3 | 0.36 | 0.26 | 0.22 |
| (1,1833) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:59:ASN:HD22 | 3 | 0.36 | 0.26 | 0.22 |
| (1,1833) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:59:ASN:HD22 | 3 | 0.36 | 0.26 | 0.22 |
| (1,2211) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:136:ARG:HD2 | 3 | 0.33 | 0.16 | 0.29 |
| (1,2211) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:136:ARG:HD2 | 3 | 0.33 | 0.16 | 0.29 |
| (1,2211) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:136:ARG:HD2 | 3 | 0.33 | 0.16 | 0.29 |
| (1,3328) | 1:A:62:ASP:HB2 | 1:A:65:VAL:HB | 3 | 0.33 | 0.09 | 0.27 |
| (1,2090) | 1:A:16:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HB | 3 | 0.29 | 0.07 | 0.29 |
| (1,2090) | 1:A:16:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HB | 3 | 0.29 | 0.07 | 0.29 |
| (1,2090) | 1:A:16:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HB | 3 | 0.29 | 0.07 | 0.29 |
| (1,2878) | 1:A:115:GLY:HA2 | 1:A:155:LYS:HE3 | 3 | 0.27 | 0.21 | 0.13 |
| (1,3238) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:176:HIS:H | 3 | 0.27 | 0.06 | 0.29 |
| (1,374) | 1:A:12:PHE:H | 1:A:12:PHE:HB3 | 3 | 0.26 | 0.05 | 0.27 |
| (1,3197) | 1:A:99:VAL:HB | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 0.26 | 0.07 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3197) | 1:A:99:VAL:HB | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 0.26 | 0.07 | 0.31 |
| (1,3197) | 1:A:99:VAL:HB | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 0.26 | 0.07 | 0.31 |
| (1,3671) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:32:VAL:HA | 3 | 0.22 | 0.1 | 0.16 |
| (1,1690) | 1:A:144:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 3 | 0.22 | 0.14 | 0.13 |
| (1,1690) | 1:A:144:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 3 | 0.22 | 0.14 | 0.13 |
| (1,1690) | 1:A:144:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 3 | 0.22 | 0.14 | 0.13 |
| (1,3058) | 1:A:121:GLU:HG2 | 1:A:122:THR:H | 3 | 0.21 | 0.02 | 0.22 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 3 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 3 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 3 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 3 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 3 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 3 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 3 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 3 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 3 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:133:PHE:HE1 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:133:PHE:HE2 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:133:PHE:HE1 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:133:PHE:HE2 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:133:PHE:HE1 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:133:PHE:HE2 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HB1 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HB2 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HB3 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HB1 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HB2 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HB3 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HB1 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HB2 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HB3 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2074) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2074) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2074) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2178) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HB | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2178) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HB | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2178) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HB | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1836) | 1:A:28:VAL:HG21 | 1:A:29:ASP:H | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1836) | 1:A:28:VAL:HG22 | 1:A:29:ASP:H | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1836) | 1:A:28:VAL:HG23 | 1:A:29:ASP:H | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,2391) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:93:ALA:HA | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,2391) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:93:ALA:HA | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,2391) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:93:ALA:HA | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1827) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:29:ASP:HB3 | 2 | 1.53 | 0.29 | 1.53 |
| (1,607) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:159:GLN:H | 2 | 0.88 | 0.34 | 0.88 |
| (1,607) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:159:GLN:H | 2 | 0.88 | 0.34 | 0.88 |
| (1,607) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:159:GLN:H | 2 | 0.88 | 0.34 | 0.88 |
| (1,2514) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:19:ALA:HA | 2 | 0.84 | 0.09 | 0.84 |
| (1,2968) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:18:ASN:HB2 | 2 | 0.84 | 0.02 | 0.84 |
| (1,3785) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:75:GLY:HA3 | 2 | 0.76 | 0.08 | 0.76 |
| (1,3785) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:75:GLY:HA3 | 2 | 0.76 | 0.08 | 0.76 |
| (1,3785) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:75:GLY:HA3 | 2 | 0.76 | 0.08 | 0.76 |
| (1,1820) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:11:HIS:HA | 2 | 0.69 | 0.1 | 0.69 |
| (1,1820) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:11:HIS:HA | 2 | 0.69 | 0.1 | 0.69 |
| (1,1820) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:11:HIS:HA | 2 | 0.69 | 0.1 | 0.69 |
| (1,149) | 1:A:123:THR:H | 1:A:124:LEU:HD21 | 2 | 0.65 | 0.04 | 0.65 |
| (1,149) | 1:A:123:THR:H | 1:A:124:LEU:HD22 | 2 | 0.65 | 0.04 | 0.65 |
| (1,149) | 1:A:123:THR:H | 1:A:124:LEU:HD23 | 2 | 0.65 | 0.04 | 0.65 |
| (1,1938) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HD22 | 2 | 0.64 | 0.01 | 0.64 |
| (1,1938) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HD22 | 2 | 0.64 | 0.01 | 0.64 |
| (1,1938) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HD22 | 2 | 0.64 | 0.01 | 0.64 |
| (1,2168) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:19:ALA:HB1 | 2 | 0.62 | 0.01 | 0.62 |
| (1,2168) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:19:ALA:HB2 | 2 | 0.62 | 0.01 | 0.62 |
| (1,2168) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:19:ALA:HB3 | 2 | 0.62 | 0.01 | 0.62 |
| (1,445) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:124:LEU:HD11 | 2 | 0.6 | 0.46 | 0.6 |
| (1,445) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:124:LEU:HD12 | 2 | 0.6 | 0.46 | 0.6 |
| (1,445) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:124:LEU:HD13 | 2 | 0.6 | 0.46 | 0.6 |
| (1,295) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:18:ASN:HB2 | 2 | 0.42 | 0.01 | 0.42 |
| (1,3800) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:114:ASP:HB3 | 2 | 0.42 | 0.32 | 0.42 |
| (1,3800) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:114:ASP:HB3 | 2 | 0.42 | 0.32 | 0.42 |
| (1,3800) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:114:ASP:HB3 | 2 | 0.42 | 0.32 | 0.42 |
| (1,3445) | 1:A:90:SER:H | 1:A:90:SER:HB2 | 2 | 0.42 | 0.1 | 0.42 |
| (1,3052) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:121:GLU:HG3 | 2 | 0.4 | 0.01 | 0.4 |
| (1,3390) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:94:GLY:H | 2 | 0.4 | 0.0 | 0.4 |
| (1,3522) | 1:A:120:SER:HB3 | 1:A:121:GLU:H | 2 | 0.4 | 0.02 | 0.4 |
| (1,3515) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:120:SER:HB3 | 2 | 0.39 | 0.07 | 0.39 |
| (1,3776) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HG21 | 2 | 0.38 | 0.04 | 0.38 |
| (1,3776) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HG22 | 2 | 0.38 | 0.04 | 0.38 |
| (1,3776) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HG23 | 2 | 0.38 | 0.04 | 0.38 |
| (1,1725) | 1:A:59:ASN:HB2 | 1:A:128:THR:HG21 | 2 | 0.35 | 0.13 | 0.35 |
| (1,1725) | 1:A:59:ASN:HB2 | 1:A:128:THR:HG22 | 2 | 0.35 | 0.13 | 0.35 |
| (1,1725) | 1:A:59:ASN:HB2 | 1:A:128:THR:HG23 | 2 | 0.35 | 0.13 | 0.35 |
| (1,2682) | 1:A:162:GLY:HA2 | 1:A:164:GLY:H | 2 | 0.34 | 0.06 | 0.34 |
| (1,3745) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HA | 2 | 0.32 | 0.01 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,454) | 1:A:170:VAL:HG21 | 1:A:171:ASN:H | 2 | 0.3 | 0.01 | 0.3 |
| (1,454) | 1:A:170:VAL:HG22 | 1:A:171:ASN:H | 2 | 0.3 | 0.01 | 0.3 |
| (1,454) | 1:A:170:VAL:HG23 | 1:A:171:ASN:H | 2 | 0.3 | 0.01 | 0.3 |
| (1,3524) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:120:SER:HB2 | 2 | 0.28 | 0.12 | 0.28 |
| (1,3524) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:120:SER:HB2 | 2 | 0.28 | 0.12 | 0.28 |
| (1,3524) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:120:SER:HB2 | 2 | 0.28 | 0.12 | 0.28 |
| (1,2886) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:171:ASN:HA | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD11 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD12 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD13 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD21 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD22 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD23 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD11 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD12 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD13 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD21 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD22 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD23 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD11 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD12 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD13 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD21 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD22 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD23 | 2 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,2912) | 1:A:62:ASP:HB2 | 1:A:65:VAL:H | 2 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (1,915) | 1:A:125:ASN:HB2 | 1:A:125:ASN:HD21 | 2 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (1,1526) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 2 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1526) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 2 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1526) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 2 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,528) | 1:A:126:ASN:H | 1:A:126:ASN:HB2 | 2 | 0.18 | 0.06 | 0.18 |
| (1,1619) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:112:THR:HG21 | 2 | 0.17 | 0.06 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:112:THR:HG22 | 2 | 0.17 | 0.06 | 0.17 |
| (1,1619) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:112:THR:HG23 | 2 | 0.17 | 0.06 | 0.17 |
| (1,3516) | 1:A:107:THR:HG21 | 1:A:120:SER:HB3 | 2 | 0.17 | 0.03 | 0.17 |
| (1,3516) | 1:A:107:THR:HG22 | 1:A:120:SER:HB3 | 2 | 0.17 | 0.03 | 0.17 |
| (1,3516) | 1:A:107:THR:HG23 | 1:A:120:SER:HB3 | 2 | 0.17 | 0.03 | 0.17 |
| (1,3261) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HB | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (1,75) | 1:A:72:ALA:H | 1:A:155:LYS:HB3 | 2 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,2704) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:160:GLY:HA2 | 2 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,2704) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:160:GLY:HA2 | 2 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,2704) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:160:GLY:HA2 | 2 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3002) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:113:LEU:HD11 | 2 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,3002) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:113:LEU:HD12 | 2 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,3002) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:113:LEU:HD13 | 2 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,3002) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:113:LEU:HD21 | 2 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,3002) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:113:LEU:HD22 | 2 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,3002) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:113:LEU:HD23 | 2 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,326) | 1:A:122:THR:H | 1:A:124:LEU:HD21 | 2 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,326) | 1:A:122:THR:H | 1:A:124:LEU:HD22 | 2 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,326) | 1:A:122:THR:H | 1:A:124:LEU:HD23 | 2 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,3415) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 2 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE1 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE2 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE1 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE2 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE1 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE2 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG21 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG22 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG23 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG21 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG22 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG23 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG21 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG22 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG23 | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,2843) | 1:A:55:ASN:H | 1:A:55:ASN:HB3 | 2 | 0.13 | 0.02 | 0.13 |
| (1,3605) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:104:LEU:HG | 2 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,3605) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:104:LEU:HG | 2 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,3605) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:104:LEU:HG | 2 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,2492) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:133:PHE:HB2 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2492) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:133:PHE:HB2 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2492) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:133:PHE:HB2 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2683) | 1:A:162:GLY:HA2 | 1:A:163:GLY:H | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,2206) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:43:ALA:HB1 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,2206) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:43:ALA:HB2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,2206) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:43:ALA:HB3 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,2207) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:52:VAL:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,2207) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:52:VAL:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,2207) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:52:VAL:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3836) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:154:PHE:HD1 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3836) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:154:PHE:HD2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3836) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:154:PHE:HD1 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3836) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:154:PHE:HD2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3836) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:154:PHE:HD1 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,3836) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:154:PHE:HD2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1452) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:122:THR:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1452) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:122:THR:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1452) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:122:THR:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,2655) | 1:A:130:THR:HA | 1:A:131:ILE:HD11 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,2655) | 1:A:130:THR:HA | 1:A:131:ILE:HD12 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,2655) | 1:A:130:THR:HA | 1:A:131:ILE:HD13 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,2889) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:155:LYS:HE2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,2889) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:155:LYS:HE2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,2889) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:155:LYS:HE2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,462) | 1:A:116:ALA:H | 1:A:169:THR:HG21 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,462) | 1:A:116:ALA:H | 1:A:169:THR:HG22 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,462) | 1:A:116:ALA:H | 1:A:169:THR:HG23 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,698) | 1:A:43:ALA:H | 1:A:143:ALA:HB1 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,698) | 1:A:43:ALA:H | 1:A:143:ALA:HB2 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,698) | 1:A:43:ALA:H | 1:A:143:ALA:HB3 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1155) | 1:A:67:SER:H | 1:A:123:THR:HG21 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1155) | 1:A:67:SER:H | 1:A:123:THR:HG22 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1155) | 1:A:67:SER:H | 1:A:123:THR:HG23 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1411) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1411) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1411) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1469) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:118:PHE:H | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1469) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:118:PHE:H | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1469) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:118:PHE:H | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1610) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:54:PHE:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1610) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:54:PHE:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1610) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:54:PHE:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1614) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:112:THR:HG21 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1614) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:112:THR:HG22 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1614) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:112:THR:HG23 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1819) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:11:HIS:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1819) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:11:HIS:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1819) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:11:HIS:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

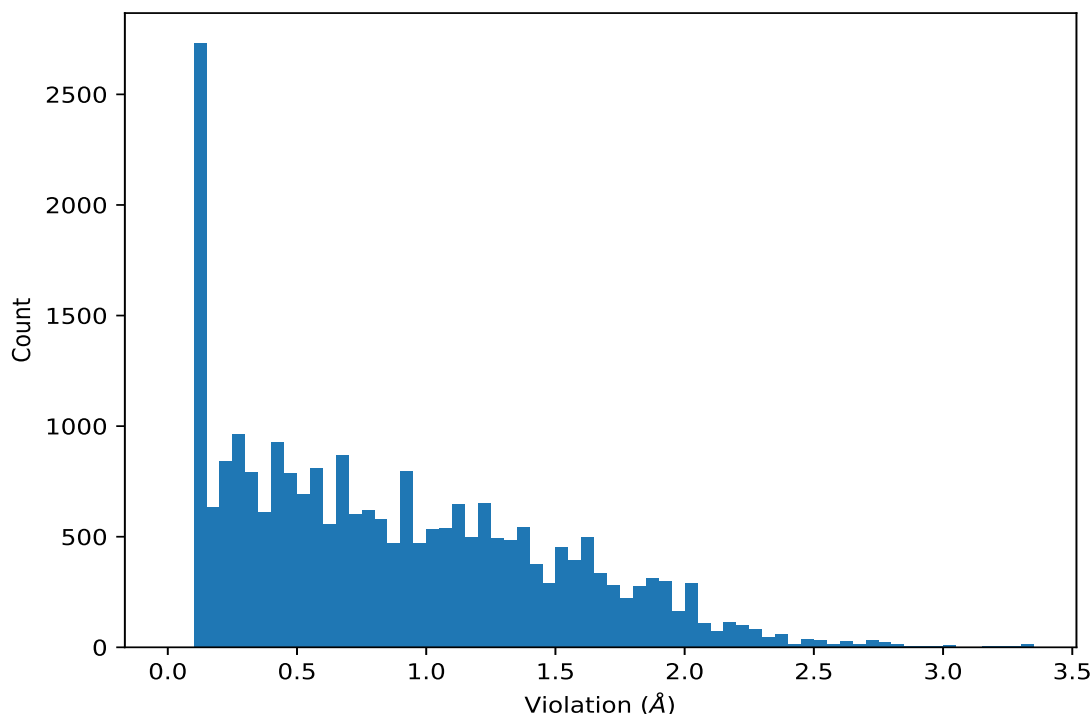
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3885) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:177:PHE:HD1 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,3885) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:177:PHE:HD2 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,3964) | 1:A:174:THR:HG21 | 1:A:176:HIS:HD2 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,3964) | 1:A:174:THR:HG22 | 1:A:176:HIS:HD2 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,3964) | 1:A:174:THR:HG23 | 1:A:176:HIS:HD2 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints [i](#)

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

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



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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 14 | 3.33 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 14 | 3.33 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 14 | 3.33 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 10 | 3.31 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 10 | 3.31 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 10 | 3.31 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 16 | 3.31 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 16 | 3.31 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 16 | 3.31 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 17 | 3.31 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 17 | 3.31 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 17 | 3.31 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 1 | 3.3 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 1 | 3.3 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 1 | 3.3 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 9 | 3.23 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 9 | 3.23 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 9 | 3.23 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 19 | 3.23 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 19 | 3.23 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 19 | 3.23 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 11 | 3.19 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 11 | 3.19 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 11 | 3.19 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 15 | 3.02 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 15 | 3.02 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 15 | 3.02 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 7 | 3.0 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 7 | 3.0 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 7 | 3.0 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 18 | 3.0 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 18 | 3.0 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 18 | 3.0 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 4 | 2.98 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 4 | 2.98 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 4 | 2.98 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 3 | 2.97 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 3 | 2.97 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 3 | 2.97 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 13 | 2.93 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 13 | 2.93 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 13 | 2.93 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:H | 17 | 2.85 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:H | 17 | 2.85 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:H | 17 | 2.85 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:H | 8 | 2.83 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:H | 8 | 2.83 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:H | 8 | 2.83 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:H | 9 | 2.83 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:H | 9 | 2.83 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:H | 9 | 2.83 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 5 | 2.82 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 5 | 2.82 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 5 | 2.82 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:H | 4 | 2.81 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:H | 4 | 2.81 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:H | 4 | 2.81 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:H | 2 | 2.79 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:H | 2 | 2.79 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:H | 2 | 2.79 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 2 | 2.77 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 2 | 2.77 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 2 | 2.77 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:H | 15 | 2.77 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:H | 15 | 2.77 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:H | 15 | 2.77 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 5 | 2.76 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 5 | 2.76 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 5 | 2.76 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 1 | 2.75 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 1 | 2.75 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 1 | 2.75 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 10 | 2.75 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 10 | 2.75 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 10 | 2.75 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 12 | 2.75 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 12 | 2.75 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 12 | 2.75 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 16 | 2.74 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 16 | 2.74 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 16 | 2.74 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 2 | 2.74 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 2 | 2.74 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 2 | 2.74 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 17 | 2.74 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 17 | 2.74 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 17 | 2.74 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 8 | 2.73 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 8 | 2.73 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 8 | 2.73 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 9 | 2.72 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 9 | 2.72 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 9 | 2.72 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 11 | 2.72 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 11 | 2.72 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 11 | 2.72 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 15 | 2.72 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 15 | 2.72 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 15 | 2.72 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:H | 11 | 2.72 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:H | 11 | 2.72 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:H | 11 | 2.72 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 16 | 2.71 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 16 | 2.71 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 16 | 2.71 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:H | 10 | 2.7 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:H | 10 | 2.7 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:H | 10 | 2.7 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 6 | 2.69 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 6 | 2.69 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 6 | 2.69 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:H | 19 | 2.69 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:H | 19 | 2.69 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:H | 19 | 2.69 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 7 | 2.68 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 7 | 2.68 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 7 | 2.68 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 20 | 2.68 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 20 | 2.68 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 20 | 2.68 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 13 | 2.67 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 13 | 2.67 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 13 | 2.67 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 14 | 2.65 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 14 | 2.65 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 14 | 2.65 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 18 | 2.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 18 | 2.65 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 18 | 2.65 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 3 | 2.64 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 3 | 2.64 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 3 | 2.64 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG11 | 20 | 2.63 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG12 | 20 | 2.63 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG13 | 20 | 2.63 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 15 | 2.63 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 15 | 2.63 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 15 | 2.63 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 19 | 2.63 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 19 | 2.63 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 19 | 2.63 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG11 | 17 | 2.61 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG12 | 17 | 2.61 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG13 | 17 | 2.61 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 13 | 2.61 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 13 | 2.61 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 13 | 2.61 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 6 | 2.6 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 6 | 2.6 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 6 | 2.6 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 14 | 2.59 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 14 | 2.59 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 14 | 2.59 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 3 | 2.58 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 3 | 2.58 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 3 | 2.58 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG21 | 13 | 2.56 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG22 | 13 | 2.56 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG23 | 13 | 2.56 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:H | 5 | 2.56 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:H | 5 | 2.56 |
| (1,1659) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:H | 5 | 2.56 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 5 | 2.54 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 5 | 2.54 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 5 | 2.54 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 20 | 2.52 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 20 | 2.52 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 20 | 2.52 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 4 | 2.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 4 | 2.52 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 4 | 2.52 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 4 | 2.52 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 4 | 2.52 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 4 | 2.52 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 4 | 2.52 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 4 | 2.52 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 4 | 2.52 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 5 | 2.52 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 5 | 2.52 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 5 | 2.52 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 5 | 2.52 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 5 | 2.52 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 5 | 2.52 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 5 | 2.52 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 5 | 2.52 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 5 | 2.52 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 8 | 2.51 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 8 | 2.51 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 8 | 2.51 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 9 | 2.51 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 9 | 2.51 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 9 | 2.51 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 10 | 2.5 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 10 | 2.5 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 10 | 2.5 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG11 | 14 | 2.49 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG12 | 14 | 2.49 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG13 | 14 | 2.49 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 19 | 2.49 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 19 | 2.49 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 19 | 2.49 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 5 | 2.49 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 5 | 2.49 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 5 | 2.49 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 3 | 2.49 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 3 | 2.49 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 3 | 2.49 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 2.49 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 2.49 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 2.49 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HD21 | 5 | 2.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HD21 | 5 | 2.47 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HD21 | 5 | 2.47 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 17 | 2.47 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 17 | 2.47 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 17 | 2.47 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 8 | 2.47 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 8 | 2.47 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 8 | 2.47 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 11 | 2.46 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 11 | 2.46 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 11 | 2.46 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA2 | 4 | 2.46 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA2 | 4 | 2.46 |
| (1,1710) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA2 | 4 | 2.46 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 5 | 2.46 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 5 | 2.46 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 5 | 2.46 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 2 | 2.45 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 2 | 2.45 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 2 | 2.45 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 11 | 2.44 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 11 | 2.44 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 11 | 2.44 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG11 | 17 | 2.43 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG12 | 17 | 2.43 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG13 | 17 | 2.43 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 2.42 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 2.42 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 2.42 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 9 | 2.41 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 9 | 2.41 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 9 | 2.41 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG11 | 1 | 2.4 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG12 | 1 | 2.4 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG13 | 1 | 2.4 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 17 | 2.4 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 17 | 2.4 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 17 | 2.4 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 18 | 2.4 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 18 | 2.4 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 18 | 2.4 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 2.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 2.4 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 2.4 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 2.4 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 2.4 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 2.4 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 2.4 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 2.4 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 2.4 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HD21 | 7 | 2.39 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HD21 | 7 | 2.39 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HD21 | 7 | 2.39 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 13 | 2.39 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 13 | 2.39 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 13 | 2.39 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 12 | 2.38 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 12 | 2.38 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 12 | 2.38 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HA | 4 | 2.38 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HA | 4 | 2.38 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HA | 4 | 2.38 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 7 | 2.38 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 7 | 2.38 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 7 | 2.38 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 8 | 2.37 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 8 | 2.37 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 8 | 2.37 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 13 | 2.37 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 13 | 2.37 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 13 | 2.37 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 13 | 2.37 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 13 | 2.37 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 13 | 2.37 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 13 | 2.37 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 13 | 2.37 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 13 | 2.37 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 6 | 2.37 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 6 | 2.37 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 6 | 2.37 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG11 | 20 | 2.36 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG12 | 20 | 2.36 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG13 | 20 | 2.36 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 13 | 2.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 13 | 2.36 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 13 | 2.36 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 16 | 2.36 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 16 | 2.36 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 16 | 2.36 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 20 | 2.35 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 20 | 2.35 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 20 | 2.35 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 6 | 2.34 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 6 | 2.34 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 6 | 2.34 |
| (1,2373) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HA | 18 | 2.34 |
| (1,2373) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HA | 18 | 2.34 |
| (1,2373) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HA | 18 | 2.34 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HB | 14 | 2.33 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HB | 14 | 2.33 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HB | 14 | 2.33 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HA | 8 | 2.33 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HA | 8 | 2.33 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HA | 8 | 2.33 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 2 | 2.33 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 2 | 2.33 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 2 | 2.33 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 3 | 2.32 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 3 | 2.32 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 3 | 2.32 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HB | 16 | 2.32 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HB | 16 | 2.32 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HB | 16 | 2.32 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB2 | 6 | 2.32 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB2 | 6 | 2.32 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB2 | 6 | 2.32 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 11 | 2.32 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 11 | 2.32 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 11 | 2.32 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG21 | 9 | 2.32 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG22 | 9 | 2.32 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG23 | 9 | 2.32 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HB | 20 | 2.31 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HB | 20 | 2.31 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HB | 20 | 2.31 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 11 | 2.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 11 | 2.31 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 11 | 2.31 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG21 | 7 | 2.31 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG22 | 7 | 2.31 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG23 | 7 | 2.31 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 14 | 2.31 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 14 | 2.31 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 14 | 2.31 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 10 | 2.31 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 10 | 2.31 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 10 | 2.31 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 16 | 2.3 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 16 | 2.3 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 16 | 2.3 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 6 | 2.3 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 6 | 2.3 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 6 | 2.3 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 17 | 2.3 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 17 | 2.3 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 17 | 2.3 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 3 | 2.3 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 3 | 2.3 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 3 | 2.3 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 2 | 2.29 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 2 | 2.29 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 2 | 2.29 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 16 | 2.29 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 16 | 2.29 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 16 | 2.29 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 16 | 2.29 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 16 | 2.29 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 16 | 2.29 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG11 | 1 | 2.28 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG12 | 1 | 2.28 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG13 | 1 | 2.28 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 1 | 2.28 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 1 | 2.28 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 1 | 2.28 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 20 | 2.28 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 20 | 2.28 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 20 | 2.28 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 7 | 2.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 7 | 2.28 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 7 | 2.28 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 17 | 2.28 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 17 | 2.28 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 17 | 2.28 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 13 | 2.27 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 13 | 2.27 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 13 | 2.27 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HA | 2 | 2.27 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HA | 2 | 2.27 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HA | 2 | 2.27 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HA | 9 | 2.27 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HA | 9 | 2.27 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HA | 9 | 2.27 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 4 | 2.27 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 4 | 2.27 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 4 | 2.27 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 5 | 2.26 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 5 | 2.26 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 5 | 2.26 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:111:LEU:HD11 | 20 | 2.26 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:111:LEU:HD12 | 20 | 2.26 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:111:LEU:HD13 | 20 | 2.26 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:111:LEU:HD11 | 20 | 2.26 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:111:LEU:HD12 | 20 | 2.26 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:111:LEU:HD13 | 20 | 2.26 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 3 | 2.26 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 3 | 2.26 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 3 | 2.26 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 7 | 2.26 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 7 | 2.26 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 7 | 2.26 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HA | 17 | 2.26 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HA | 17 | 2.26 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HA | 17 | 2.26 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 2.26 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 2.26 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 2.26 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 2.26 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 2.26 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 2.26 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 10 | 2.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 10 | 2.25 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 10 | 2.25 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG21 | 19 | 2.25 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG22 | 19 | 2.25 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG23 | 19 | 2.25 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 6 | 2.25 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 6 | 2.25 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 6 | 2.25 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:H | 4 | 2.25 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 4 | 2.25 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:H | 4 | 2.25 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE1 | 15 | 2.24 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE2 | 15 | 2.24 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE1 | 15 | 2.24 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE2 | 15 | 2.24 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE1 | 15 | 2.24 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE2 | 15 | 2.24 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 14 | 2.24 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 14 | 2.24 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 14 | 2.24 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 20 | 2.24 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 20 | 2.24 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 20 | 2.24 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HA | 11 | 2.24 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HA | 11 | 2.24 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HA | 11 | 2.24 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 2.24 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 2.24 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 2.24 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 12 | 2.23 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 12 | 2.23 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 12 | 2.23 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG21 | 6 | 2.23 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG22 | 6 | 2.23 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG23 | 6 | 2.23 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 13 | 2.23 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 13 | 2.23 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 13 | 2.23 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 13 | 2.23 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 13 | 2.23 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 13 | 2.23 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 13 | 2.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 13 | 2.23 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 13 | 2.23 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 10 | 2.23 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 10 | 2.23 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 10 | 2.23 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 2.23 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 2.23 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 2.23 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 20 | 2.22 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 20 | 2.22 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 20 | 2.22 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 2 | 2.22 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 2 | 2.22 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 2 | 2.22 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 16 | 2.22 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 16 | 2.22 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 16 | 2.22 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 19 | 2.22 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 19 | 2.22 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 19 | 2.22 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 8 | 2.22 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 8 | 2.22 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 8 | 2.22 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG21 | 17 | 2.22 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG22 | 17 | 2.22 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG23 | 17 | 2.22 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG21 | 20 | 2.22 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG22 | 20 | 2.22 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG23 | 20 | 2.22 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG21 | 20 | 2.21 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG22 | 20 | 2.21 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG23 | 20 | 2.21 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 12 | 2.21 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 12 | 2.21 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 12 | 2.21 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:HA | 7 | 2.21 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:HA | 7 | 2.21 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:HA | 7 | 2.21 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 11 | 2.21 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 11 | 2.21 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 11 | 2.21 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 6 | 2.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 6 | 2.2 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 6 | 2.2 |
| (1,732) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:130:THR:H | 18 | 2.2 |
| (1,732) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:130:THR:H | 18 | 2.2 |
| (1,732) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:130:THR:H | 18 | 2.2 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 2.2 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 2.2 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 2.2 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 2.2 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 2.2 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 2.2 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 11 | 2.2 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 11 | 2.2 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 11 | 2.2 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 13 | 2.2 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 13 | 2.2 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 13 | 2.2 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 3 | 2.2 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 3 | 2.2 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 3 | 2.2 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 3 | 2.2 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 3 | 2.2 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 3 | 2.2 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 3 | 2.2 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 3 | 2.2 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 3 | 2.2 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 16 | 2.2 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 16 | 2.2 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 16 | 2.2 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 2.19 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 2.19 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 2.19 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 2.19 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 2.19 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 2.19 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 2.19 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 2.19 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 2.19 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 2.19 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 2.19 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 2.19 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 2.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 2.19 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 2.19 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 2.19 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 2.19 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 2.19 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE1 | 19 | 2.19 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE2 | 19 | 2.19 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE1 | 19 | 2.19 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE2 | 19 | 2.19 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE1 | 19 | 2.19 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE2 | 19 | 2.19 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 7 | 2.19 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 7 | 2.19 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 7 | 2.19 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 17 | 2.19 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 17 | 2.19 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 17 | 2.19 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 19 | 2.19 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 19 | 2.19 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 19 | 2.19 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG11 | 14 | 2.18 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG12 | 14 | 2.18 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG13 | 14 | 2.18 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE3 | 8 | 2.18 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE3 | 8 | 2.18 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE3 | 8 | 2.18 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 3 | 2.18 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 3 | 2.18 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 3 | 2.18 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG21 | 14 | 2.18 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG22 | 14 | 2.18 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG23 | 14 | 2.18 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 18 | 2.18 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 18 | 2.18 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 18 | 2.18 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 10 | 2.18 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 10 | 2.18 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 10 | 2.18 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 10 | 2.18 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 10 | 2.18 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 10 | 2.18 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 10 | 2.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 10 | 2.18 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 10 | 2.18 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 18 | 2.17 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 18 | 2.17 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 18 | 2.17 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG21 | 14 | 2.17 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG22 | 14 | 2.17 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG23 | 14 | 2.17 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 2.16 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 2.16 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 2.16 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 2.16 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 2.16 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 2.16 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 16 | 2.16 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 16 | 2.16 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 16 | 2.16 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 7 | 2.16 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 7 | 2.16 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 7 | 2.16 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 3 | 2.16 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 3 | 2.16 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 3 | 2.16 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 3 | 2.16 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 3 | 2.16 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 3 | 2.16 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 3 | 2.16 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 3 | 2.16 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 3 | 2.16 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HA | 4 | 2.16 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HA | 4 | 2.16 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HA | 4 | 2.16 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HA | 15 | 2.16 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HA | 15 | 2.16 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HA | 15 | 2.16 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:H | 7 | 2.16 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 7 | 2.16 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:H | 7 | 2.16 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 3 | 2.16 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 3 | 2.16 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 3 | 2.16 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 3 | 2.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 3 | 2.16 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 3 | 2.16 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 3 | 2.16 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 3 | 2.16 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 3 | 2.16 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 2.16 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 2.16 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 2.16 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 6 | 2.15 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 6 | 2.15 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 6 | 2.15 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 5 | 2.15 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 5 | 2.15 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 5 | 2.15 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 1 | 2.15 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 1 | 2.15 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 1 | 2.15 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 19 | 2.14 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 19 | 2.14 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 19 | 2.14 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 5 | 2.14 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 5 | 2.14 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 5 | 2.14 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 18 | 2.14 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 18 | 2.14 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 18 | 2.14 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 8 | 2.14 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 8 | 2.14 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 8 | 2.14 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 2 | 2.14 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 2 | 2.14 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 2 | 2.14 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG11 | 14 | 2.14 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG12 | 14 | 2.14 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG13 | 14 | 2.14 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 2.13 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 2.13 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 2.13 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 2.13 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 2.13 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 2.13 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 2.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 2.13 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 2.13 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 2.13 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 2.13 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 2.13 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE3 | 19 | 2.13 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE3 | 19 | 2.13 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE3 | 19 | 2.13 |
| (1,2373) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HA | 10 | 2.13 |
| (1,2373) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HA | 10 | 2.13 |
| (1,2373) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HA | 10 | 2.13 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 10 | 2.12 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HA | 10 | 2.12 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HA | 10 | 2.12 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HA | 10 | 2.12 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 19 | 2.12 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 19 | 2.12 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 19 | 2.12 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG21 | 18 | 2.12 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG22 | 18 | 2.12 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG23 | 18 | 2.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 10 | 2.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 10 | 2.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 10 | 2.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 10 | 2.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 10 | 2.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 10 | 2.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 10 | 2.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 10 | 2.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 10 | 2.12 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 7 | 2.12 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 7 | 2.12 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 7 | 2.12 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 13 | 2.12 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 13 | 2.12 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 13 | 2.12 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG21 | 2 | 2.11 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG22 | 2 | 2.11 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG23 | 2 | 2.11 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HA | 19 | 2.11 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HA | 19 | 2.11 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HA | 19 | 2.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG21 | 9 | 2.1 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG22 | 9 | 2.1 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG23 | 9 | 2.1 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 20 | 2.1 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 20 | 2.1 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 20 | 2.1 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 2.09 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 2.09 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 2.09 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 2.09 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 2.09 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 2.09 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 2.09 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 2.09 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 2.09 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 2.09 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 2.09 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 2.09 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 7 | 2.09 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 7 | 2.09 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 7 | 2.09 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 11 | 2.09 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 11 | 2.09 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 11 | 2.09 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 4 | 2.09 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 4 | 2.09 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 4 | 2.09 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 7 | 2.09 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 7 | 2.09 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 7 | 2.09 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 12 | 2.09 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 12 | 2.09 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 12 | 2.09 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 18 | 2.09 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 18 | 2.09 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 18 | 2.09 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 18 | 2.09 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 18 | 2.09 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 18 | 2.09 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 18 | 2.09 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 18 | 2.09 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 18 | 2.09 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HA | 10 | 2.09 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HA | 10 | 2.09 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HA | 10 | 2.09 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:H | 13 | 2.09 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 13 | 2.09 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:H | 13 | 2.09 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 12 | 2.08 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 12 | 2.08 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 12 | 2.08 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 2.08 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 2.08 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 2.08 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 2.08 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 2.08 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 2.08 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE1 | 18 | 2.08 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE2 | 18 | 2.08 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE1 | 18 | 2.08 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE2 | 18 | 2.08 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE1 | 18 | 2.08 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE2 | 18 | 2.08 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HA | 5 | 2.08 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HA | 5 | 2.08 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HA | 5 | 2.08 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:H | 12 | 2.08 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 12 | 2.08 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:H | 12 | 2.08 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:H | 14 | 2.08 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 14 | 2.08 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:H | 14 | 2.08 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 11 | 2.07 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 11 | 2.07 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 11 | 2.07 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 1 | 2.07 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 1 | 2.07 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 1 | 2.07 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 14 | 2.07 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 14 | 2.07 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 14 | 2.07 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 11 | 2.07 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 11 | 2.07 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 11 | 2.07 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 13 | 2.07 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 13 | 2.07 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 13 | 2.07 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HA | 13 | 2.07 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HA | 13 | 2.07 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HA | 13 | 2.07 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE1 | 2 | 2.06 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE2 | 2 | 2.06 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE1 | 2 | 2.06 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE2 | 2 | 2.06 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE1 | 2 | 2.06 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE2 | 2 | 2.06 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 17 | 2.06 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 17 | 2.06 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 17 | 2.06 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 15 | 2.06 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 15 | 2.06 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 15 | 2.06 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG21 | 15 | 2.06 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG22 | 15 | 2.06 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG23 | 15 | 2.06 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 11 | 2.06 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 11 | 2.06 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 11 | 2.06 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 11 | 2.06 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 11 | 2.06 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 11 | 2.06 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 11 | 2.06 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 11 | 2.06 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 11 | 2.06 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG21 | 5 | 2.05 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG22 | 5 | 2.05 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG23 | 5 | 2.05 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HB | 1 | 2.05 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HB | 1 | 2.05 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HB | 1 | 2.05 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 14 | 2.05 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 14 | 2.05 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 14 | 2.05 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG21 | 16 | 2.05 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG22 | 16 | 2.05 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG23 | 16 | 2.05 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG11 | 10 | 2.05 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG12 | 10 | 2.05 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG13 | 10 | 2.05 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 19 | 2.05 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 19 | 2.05 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 19 | 2.05 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 3 | 2.05 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 3 | 2.05 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 3 | 2.05 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG11 | 13 | 2.04 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG12 | 13 | 2.04 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG13 | 13 | 2.04 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE1 | 7 | 2.04 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE2 | 7 | 2.04 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE1 | 7 | 2.04 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE2 | 7 | 2.04 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE1 | 7 | 2.04 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE2 | 7 | 2.04 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 2.04 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 2.04 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 2.04 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 2.04 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 2.04 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 2.04 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 2.04 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 2.04 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 2.04 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 2.04 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 2.04 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 2.04 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 18 | 2.04 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 18 | 2.04 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 18 | 2.04 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 18 | 2.04 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 18 | 2.04 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 18 | 2.04 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 1 | 2.04 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 1 | 2.04 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 1 | 2.04 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 4 | 2.04 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 4 | 2.04 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 4 | 2.04 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 10 | 2.04 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 10 | 2.04 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 10 | 2.04 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 19 | 2.04 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 19 | 2.04 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 19 | 2.04 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 6 | 2.04 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 6 | 2.04 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 6 | 2.04 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 6 | 2.04 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 6 | 2.04 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 6 | 2.04 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 6 | 2.04 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 6 | 2.04 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 6 | 2.04 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 8 | 2.04 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 8 | 2.04 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 8 | 2.04 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 8 | 2.04 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 8 | 2.04 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 8 | 2.04 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 8 | 2.04 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 8 | 2.04 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 8 | 2.04 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 2.03 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 2.03 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 2.03 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 2.03 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 2.03 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 2.03 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 2.03 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 2.03 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 2.03 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 2.03 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 2.03 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 2.03 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 2.03 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 2.03 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 2.03 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 2.03 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 2.03 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 2.03 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 11 | 2.03 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 11 | 2.03 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 11 | 2.03 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG21 | 13 | 2.03 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG22 | 13 | 2.03 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG23 | 13 | 2.03 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG21 | 13 | 2.03 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG22 | 13 | 2.03 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG23 | 13 | 2.03 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 16 | 2.03 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 16 | 2.03 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 16 | 2.03 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 16 | 2.03 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 16 | 2.03 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 16 | 2.03 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 16 | 2.03 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 16 | 2.03 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 16 | 2.03 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 2.02 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 2.02 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 2.02 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 2.02 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 2.02 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 2.02 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE1 | 8 | 2.02 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE2 | 8 | 2.02 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE1 | 8 | 2.02 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE2 | 8 | 2.02 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE1 | 8 | 2.02 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE2 | 8 | 2.02 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 10 | 2.02 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 10 | 2.02 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 10 | 2.02 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 10 | 2.02 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 10 | 2.02 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 10 | 2.02 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 2 | 2.02 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 2 | 2.02 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 2 | 2.02 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 12 | 2.02 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 12 | 2.02 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 12 | 2.02 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 10 | 2.02 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 10 | 2.02 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 10 | 2.02 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HA | 14 | 2.02 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HA | 14 | 2.02 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HA | 14 | 2.02 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HA | 5 | 2.02 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HA | 5 | 2.02 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HA | 5 | 2.02 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HA | 10 | 2.02 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HA | 10 | 2.02 |
| (1,1696) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HA | 10 | 2.02 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:H | 18 | 2.02 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:111:LEU:H | 18 | 2.02 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:111:LEU:H | 18 | 2.02 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 2.02 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 2.02 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 2.02 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 2.02 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 2.02 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 2.02 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 2.02 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 2.02 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 2.02 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 16 | 2.02 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 16 | 2.02 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 16 | 2.02 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE1 | 1 | 2.01 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE2 | 1 | 2.01 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE1 | 1 | 2.01 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE2 | 1 | 2.01 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE1 | 1 | 2.01 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE2 | 1 | 2.01 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 2.01 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 2.01 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 2.01 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 2.01 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 2.01 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 2.01 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE1 | 3 | 2.01 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE2 | 3 | 2.01 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE1 | 3 | 2.01 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE2 | 3 | 2.01 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE1 | 3 | 2.01 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE2 | 3 | 2.01 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:111:LEU:HD11 | 16 | 2.01 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:111:LEU:HD12 | 16 | 2.01 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:111:LEU:HD13 | 16 | 2.01 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:111:LEU:HD11 | 16 | 2.01 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:111:LEU:HD12 | 16 | 2.01 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:111:LEU:HD13 | 16 | 2.01 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 4 | 2.01 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 4 | 2.01 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 4 | 2.01 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 10 | 2.01 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 10 | 2.01 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 10 | 2.01 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 18 | 2.01 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 18 | 2.01 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 18 | 2.01 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 8 | 2.01 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 8 | 2.01 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 8 | 2.01 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG21 | 4 | 2.01 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG22 | 4 | 2.01 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG23 | 4 | 2.01 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG11 | 10 | 2.01 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG12 | 10 | 2.01 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG13 | 10 | 2.01 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 20 | 2.01 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 20 | 2.01 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 20 | 2.01 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 20 | 2.01 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 20 | 2.01 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 20 | 2.01 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 20 | 2.01 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 20 | 2.01 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 20 | 2.01 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 18 | 2.01 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 18 | 2.01 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 18 | 2.01 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 18 | 2.01 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 18 | 2.01 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 18 | 2.01 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 18 | 2.01 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 18 | 2.01 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 18 | 2.01 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 3 | 2.0 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 3 | 2.0 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 3 | 2.0 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD1 | 19 | 2.0 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD2 | 19 | 2.0 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD1 | 19 | 2.0 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD2 | 19 | 2.0 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD1 | 19 | 2.0 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD2 | 19 | 2.0 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD1 | 9 | 2.0 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD2 | 9 | 2.0 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD1 | 9 | 2.0 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD2 | 9 | 2.0 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD1 | 9 | 2.0 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD2 | 9 | 2.0 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 16 | 2.0 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 16 | 2.0 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 16 | 2.0 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:111:LEU:HD11 | 16 | 2.0 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:111:LEU:HD12 | 16 | 2.0 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:111:LEU:HD13 | 16 | 2.0 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:111:LEU:HD11 | 16 | 2.0 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:111:LEU:HD12 | 16 | 2.0 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:111:LEU:HD13 | 16 | 2.0 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:111:LEU:HD11 | 20 | 2.0 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:111:LEU:HD12 | 20 | 2.0 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:111:LEU:HD13 | 20 | 2.0 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:111:LEU:HD11 | 20 | 2.0 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:111:LEU:HD12 | 20 | 2.0 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:111:LEU:HD13 | 20 | 2.0 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 5 | 2.0 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 5 | 2.0 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 5 | 2.0 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 13 | 2.0 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 13 | 2.0 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 13 | 2.0 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 14 | 2.0 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 14 | 2.0 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 14 | 2.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 3 | 2.0 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 3 | 2.0 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 3 | 2.0 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HA | 6 | 2.0 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HA | 6 | 2.0 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HA | 6 | 2.0 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 8 | 2.0 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 8 | 2.0 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 8 | 2.0 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 8 | 2.0 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 8 | 2.0 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 8 | 2.0 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 8 | 2.0 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 8 | 2.0 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 8 | 2.0 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 15 | 2.0 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 15 | 2.0 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 15 | 2.0 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 15 | 2.0 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 15 | 2.0 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 15 | 2.0 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 15 | 2.0 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 15 | 2.0 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 15 | 2.0 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:111:LEU:HD11 | 18 | 1.99 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:111:LEU:HD12 | 18 | 1.99 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:111:LEU:HD13 | 18 | 1.99 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:111:LEU:HD11 | 18 | 1.99 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:111:LEU:HD12 | 18 | 1.99 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:111:LEU:HD13 | 18 | 1.99 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG11 | 13 | 1.99 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG12 | 13 | 1.99 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG13 | 13 | 1.99 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 17 | 1.99 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 17 | 1.99 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 17 | 1.99 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 1 | 1.99 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 1 | 1.99 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 1 | 1.99 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 10 | 1.99 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 10 | 1.99 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 10 | 1.99 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 14 | 1.99 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 14 | 1.99 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 14 | 1.99 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 19 | 1.99 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 19 | 1.99 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 19 | 1.99 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 9 | 1.99 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 9 | 1.99 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 9 | 1.99 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 15 | 1.99 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 15 | 1.99 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 15 | 1.99 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG11 | 1 | 1.99 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG12 | 1 | 1.99 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG13 | 1 | 1.99 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 14 | 1.99 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 14 | 1.99 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 14 | 1.99 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD1 | 12 | 1.98 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD2 | 12 | 1.98 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD1 | 12 | 1.98 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD2 | 12 | 1.98 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD1 | 12 | 1.98 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD2 | 12 | 1.98 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD1 | 15 | 1.98 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD2 | 15 | 1.98 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD1 | 15 | 1.98 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD2 | 15 | 1.98 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD1 | 15 | 1.98 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD2 | 15 | 1.98 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 14 | 1.98 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 14 | 1.98 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 14 | 1.98 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 4 | 1.98 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 4 | 1.98 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 4 | 1.98 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 9 | 1.98 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 9 | 1.98 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 9 | 1.98 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 14 | 1.98 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 14 | 1.98 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 14 | 1.98 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG11 | 2 | 1.98 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG12 | 2 | 1.98 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG13 | 2 | 1.98 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:H | 16 | 1.98 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:111:LEU:H | 16 | 1.98 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:111:LEU:H | 16 | 1.98 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE3 | 6 | 1.97 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE3 | 6 | 1.97 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE3 | 6 | 1.97 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 2 | 1.97 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 2 | 1.97 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 2 | 1.97 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 11 | 1.97 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 11 | 1.97 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 11 | 1.97 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 11 | 1.97 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 11 | 1.97 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 11 | 1.97 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 11 | 1.97 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 11 | 1.97 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 11 | 1.97 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 1 | 1.97 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 1 | 1.97 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 1 | 1.97 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 1 | 1.97 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 1 | 1.97 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 1 | 1.97 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 1 | 1.97 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 1 | 1.97 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 1 | 1.97 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 4 | 1.97 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 4 | 1.97 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 4 | 1.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 18 | 1.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 18 | 1.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 18 | 1.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 18 | 1.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 18 | 1.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 18 | 1.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 18 | 1.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 18 | 1.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 18 | 1.97 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 19 | 1.97 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 19 | 1.97 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 19 | 1.97 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE1 | 17 | 1.96 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE2 | 17 | 1.96 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE1 | 17 | 1.96 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE2 | 17 | 1.96 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE1 | 17 | 1.96 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE2 | 17 | 1.96 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE1 | 13 | 1.96 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE2 | 13 | 1.96 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE1 | 13 | 1.96 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE2 | 13 | 1.96 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE1 | 13 | 1.96 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE2 | 13 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 2 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 2 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 2 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 2 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 2 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 2 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 2 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 2 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 2 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 4 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 4 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 4 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 4 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 4 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 4 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 4 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 4 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 4 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 9 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 9 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 9 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 9 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 9 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 9 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 9 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 9 | 1.96 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 9 | 1.96 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG11 | 3 | 1.96 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG12 | 3 | 1.96 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG13 | 3 | 1.96 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG11 | 3 | 1.96 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG12 | 3 | 1.96 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG13 | 3 | 1.96 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG11 | 3 | 1.96 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG12 | 3 | 1.96 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG13 | 3 | 1.96 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 4 | 1.96 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 4 | 1.96 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 4 | 1.96 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 4 | 1.96 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 4 | 1.96 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 4 | 1.96 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 4 | 1.96 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 4 | 1.96 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 4 | 1.96 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:H | 20 | 1.96 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:111:LEU:H | 20 | 1.96 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:111:LEU:H | 20 | 1.96 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 11 | 1.95 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 11 | 1.95 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 11 | 1.95 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 3 | 1.95 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 3 | 1.95 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 3 | 1.95 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 12 | 1.95 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 12 | 1.95 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 12 | 1.95 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 12 | 1.95 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 12 | 1.95 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 12 | 1.95 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 12 | 1.95 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 12 | 1.95 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 12 | 1.95 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG11 | 9 | 1.95 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG12 | 9 | 1.95 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG13 | 9 | 1.95 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG11 | 15 | 1.95 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG12 | 15 | 1.95 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG13 | 15 | 1.95 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 2 | 1.95 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 2 | 1.95 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 2 | 1.95 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 2 | 1.95 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 2 | 1.95 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 2 | 1.95 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 2 | 1.95 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 2 | 1.95 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 2 | 1.95 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 20 | 1.95 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 20 | 1.95 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 20 | 1.95 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 20 | 1.95 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 20 | 1.95 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 20 | 1.95 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 20 | 1.95 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 20 | 1.95 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 20 | 1.95 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 8 | 1.95 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 8 | 1.95 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 8 | 1.95 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 20 | 1.95 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 20 | 1.95 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 20 | 1.95 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 20 | 1.94 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 20 | 1.94 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 20 | 1.94 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 3 | 1.94 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 3 | 1.94 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 3 | 1.94 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 3 | 1.94 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 3 | 1.94 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 3 | 1.94 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 1 | 1.94 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 1 | 1.94 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 1 | 1.94 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 16 | 1.94 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 16 | 1.94 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 16 | 1.94 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 17 | 1.94 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 17 | 1.94 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 17 | 1.94 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 3 | 1.94 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 3 | 1.94 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 3 | 1.94 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 17 | 1.94 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 17 | 1.94 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 17 | 1.94 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 17 | 1.94 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 17 | 1.94 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 17 | 1.94 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 17 | 1.94 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 17 | 1.94 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 17 | 1.94 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HA | 20 | 1.94 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HA | 20 | 1.94 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HA | 20 | 1.94 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:H | 16 | 1.94 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 16 | 1.94 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:H | 16 | 1.94 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:H | 14 | 1.94 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:111:LEU:H | 14 | 1.94 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:111:LEU:H | 14 | 1.94 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 12 | 1.93 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 12 | 1.93 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 12 | 1.93 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 2 | 1.93 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 2 | 1.93 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 2 | 1.93 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 16 | 1.93 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 16 | 1.93 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 16 | 1.93 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 19 | 1.93 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 19 | 1.93 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 19 | 1.93 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 19 | 1.93 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 19 | 1.93 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 19 | 1.93 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 19 | 1.93 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 19 | 1.93 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 19 | 1.93 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG21 | 8 | 1.93 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG22 | 8 | 1.93 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG23 | 8 | 1.93 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG21 | 1:A:124:LEU:HD21 | 10 | 1.93 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG21 | 1:A:124:LEU:HD22 | 10 | 1.93 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG21 | 1:A:124:LEU:HD23 | 10 | 1.93 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG22 | 1:A:124:LEU:HD21 | 10 | 1.93 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG22 | 1:A:124:LEU:HD22 | 10 | 1.93 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG22 | 1:A:124:LEU:HD23 | 10 | 1.93 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG23 | 1:A:124:LEU:HD21 | 10 | 1.93 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG23 | 1:A:124:LEU:HD22 | 10 | 1.93 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG23 | 1:A:124:LEU:HD23 | 10 | 1.93 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB3 | 15 | 1.93 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB3 | 15 | 1.93 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB3 | 15 | 1.93 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:H | 19 | 1.93 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:111:LEU:H | 19 | 1.93 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:111:LEU:H | 19 | 1.93 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 1 | 1.93 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 1 | 1.93 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 1 | 1.93 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 1 | 1.93 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 1 | 1.93 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 1 | 1.93 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 1 | 1.93 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 1 | 1.93 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 1 | 1.93 |
| (1,708) | 1:A:66:ALA:H | 1:A:124:LEU:HD11 | 13 | 1.92 |
| (1,708) | 1:A:66:ALA:H | 1:A:124:LEU:HD12 | 13 | 1.92 |
| (1,708) | 1:A:66:ALA:H | 1:A:124:LEU:HD13 | 13 | 1.92 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 2 | 1.92 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 2 | 1.92 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 2 | 1.92 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 1.92 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 1.92 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 1.92 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 1.92 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 1.92 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 1.92 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 1.92 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 1.92 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 1.92 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 1.92 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 1.92 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 1.92 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 6 | 1.92 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 6 | 1.92 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 6 | 1.92 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 15 | 1.92 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 15 | 1.92 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 15 | 1.92 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 16 | 1.92 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 16 | 1.92 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 16 | 1.92 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 19 | 1.92 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 19 | 1.92 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 19 | 1.92 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 6 | 1.92 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 6 | 1.92 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 6 | 1.92 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 8 | 1.92 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 8 | 1.92 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 8 | 1.92 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 1 | 1.92 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 1 | 1.92 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 1 | 1.92 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 1 | 1.92 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 1 | 1.92 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 1 | 1.92 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 1 | 1.92 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 1 | 1.92 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 1 | 1.92 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 5 | 1.92 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 5 | 1.92 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 5 | 1.92 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 5 | 1.92 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 5 | 1.92 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 5 | 1.92 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 5 | 1.92 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 5 | 1.92 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 5 | 1.92 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG11 | 18 | 1.92 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG12 | 18 | 1.92 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG13 | 18 | 1.92 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 18 | 1.92 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 18 | 1.92 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 18 | 1.92 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 16 | 1.92 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 16 | 1.92 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 16 | 1.92 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:H | 10 | 1.92 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:111:LEU:H | 10 | 1.92 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:111:LEU:H | 10 | 1.92 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 10 | 1.91 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 10 | 1.91 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 10 | 1.91 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE1 | 20 | 1.91 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE2 | 20 | 1.91 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE1 | 20 | 1.91 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE2 | 20 | 1.91 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE1 | 20 | 1.91 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE2 | 20 | 1.91 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE1 | 4 | 1.91 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE2 | 4 | 1.91 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE1 | 4 | 1.91 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE2 | 4 | 1.91 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE1 | 4 | 1.91 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE2 | 4 | 1.91 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 16 | 1.91 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 16 | 1.91 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 16 | 1.91 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 16 | 1.91 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 16 | 1.91 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 16 | 1.91 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 7 | 1.91 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 7 | 1.91 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 7 | 1.91 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 5 | 1.91 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 5 | 1.91 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 5 | 1.91 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 13 | 1.91 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 13 | 1.91 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 13 | 1.91 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 17 | 1.91 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 17 | 1.91 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 17 | 1.91 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 1.91 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 1.91 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 1.91 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 3 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 3 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 3 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 3 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 3 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 3 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 3 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 3 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 3 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 7 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 7 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 7 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 7 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 7 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 7 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 7 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 7 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 7 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 8 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 8 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 8 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 8 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 8 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 8 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 8 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 8 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 8 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 16 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 16 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 16 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 16 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 16 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 16 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 16 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 16 | 1.91 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 16 | 1.91 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 10 | 1.91 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 10 | 1.91 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 10 | 1.91 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 16 | 1.91 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 16 | 1.91 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 16 | 1.91 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG21 | 10 | 1.91 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG22 | 10 | 1.91 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG23 | 10 | 1.91 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG11 | 17 | 1.91 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG12 | 17 | 1.91 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG13 | 17 | 1.91 |
| (1,1939) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HB3 | 18 | 1.91 |
| (1,1939) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HB3 | 18 | 1.91 |
| (1,1939) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HB3 | 18 | 1.91 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 14 | 1.91 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 14 | 1.91 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 14 | 1.91 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 14 | 1.91 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 14 | 1.91 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 14 | 1.91 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 14 | 1.91 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 14 | 1.91 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 14 | 1.91 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 11 | 1.91 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 11 | 1.91 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 11 | 1.91 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 11 | 1.91 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 11 | 1.91 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 11 | 1.91 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 11 | 1.91 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 11 | 1.91 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 11 | 1.91 |
| (1,708) | 1:A:66:ALA:H | 1:A:124:LEU:HD11 | 15 | 1.9 |
| (1,708) | 1:A:66:ALA:H | 1:A:124:LEU:HD12 | 15 | 1.9 |
| (1,708) | 1:A:66:ALA:H | 1:A:124:LEU:HD13 | 15 | 1.9 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 13 | 1.9 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 13 | 1.9 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 13 | 1.9 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 15 | 1.9 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 15 | 1.9 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 15 | 1.9 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 15 | 1.9 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 15 | 1.9 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 15 | 1.9 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 15 | 1.9 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 15 | 1.9 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 15 | 1.9 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 15 | 1.9 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 15 | 1.9 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 15 | 1.9 |
| (1,2373) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HA | 13 | 1.9 |
| (1,2373) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HA | 13 | 1.9 |
| (1,2373) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HA | 13 | 1.9 |
| (1,1939) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HB3 | 10 | 1.9 |
| (1,1939) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HB3 | 10 | 1.9 |
| (1,1939) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HB3 | 10 | 1.9 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 6 | 1.9 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 6 | 1.9 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 6 | 1.9 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 6 | 1.9 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 6 | 1.9 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 6 | 1.9 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 6 | 1.9 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 6 | 1.9 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 6 | 1.9 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:H | 9 | 1.9 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 9 | 1.9 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:H | 9 | 1.9 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:H | 2 | 1.9 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:111:LEU:H | 2 | 1.9 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:111:LEU:H | 2 | 1.9 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:H | 8 | 1.9 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:111:LEU:H | 8 | 1.9 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:111:LEU:H | 8 | 1.9 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 1.89 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 1.89 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 1.89 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 7 | 1.89 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 7 | 1.89 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 7 | 1.89 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 6 | 1.89 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 6 | 1.89 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 6 | 1.89 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 6 | 1.89 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 6 | 1.89 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 6 | 1.89 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 6 | 1.89 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 6 | 1.89 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 6 | 1.89 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 5 | 1.89 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 5 | 1.89 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 5 | 1.89 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG11 | 3 | 1.89 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG12 | 3 | 1.89 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG13 | 3 | 1.89 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG11 | 12 | 1.89 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG12 | 12 | 1.89 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG13 | 12 | 1.89 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG11 | 19 | 1.89 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG12 | 19 | 1.89 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG13 | 19 | 1.89 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB3 | 4 | 1.89 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB3 | 4 | 1.89 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB3 | 4 | 1.89 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:H | 4 | 1.89 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:H | 4 | 1.89 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:H | 4 | 1.89 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 5 | 1.88 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 5 | 1.88 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 5 | 1.88 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 8 | 1.88 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 8 | 1.88 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 8 | 1.88 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 9 | 1.88 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 9 | 1.88 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 9 | 1.88 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 15 | 1.88 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 15 | 1.88 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 15 | 1.88 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE1 | 17 | 1.88 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE2 | 17 | 1.88 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE1 | 17 | 1.88 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE2 | 17 | 1.88 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE1 | 17 | 1.88 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE2 | 17 | 1.88 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 1.88 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 1.88 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 1.88 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 1.88 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 1.88 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 1.88 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD1 | 15 | 1.88 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD2 | 15 | 1.88 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD1 | 15 | 1.88 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD2 | 15 | 1.88 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD1 | 15 | 1.88 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD2 | 15 | 1.88 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 4 | 1.88 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 4 | 1.88 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 4 | 1.88 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD1 | 11 | 1.88 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD2 | 11 | 1.88 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD1 | 11 | 1.88 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD2 | 11 | 1.88 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD1 | 11 | 1.88 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD2 | 11 | 1.88 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE3 | 5 | 1.88 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE3 | 5 | 1.88 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE3 | 5 | 1.88 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 4 | 1.88 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 4 | 1.88 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 4 | 1.88 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 2 | 1.88 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 10 | 1.88 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 10 | 1.88 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 10 | 1.88 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 10 | 1.88 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 10 | 1.88 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 10 | 1.88 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 10 | 1.88 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 10 | 1.88 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 10 | 1.88 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 18 | 1.88 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 18 | 1.88 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 18 | 1.88 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG11 | 13 | 1.88 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG12 | 13 | 1.88 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG13 | 13 | 1.88 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 12 | 1.88 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 12 | 1.88 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 12 | 1.88 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 12 | 1.88 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 12 | 1.88 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 12 | 1.88 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 12 | 1.88 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 12 | 1.88 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 12 | 1.88 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 15 | 1.88 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 15 | 1.88 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 15 | 1.88 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 17 | 1.87 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 17 | 1.87 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 17 | 1.87 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE1 | 2 | 1.87 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE2 | 2 | 1.87 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE1 | 2 | 1.87 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE2 | 2 | 1.87 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE1 | 2 | 1.87 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE2 | 2 | 1.87 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE1 | 7 | 1.87 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE2 | 7 | 1.87 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE1 | 7 | 1.87 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE2 | 7 | 1.87 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE1 | 7 | 1.87 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE2 | 7 | 1.87 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD1 | 4 | 1.87 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD2 | 4 | 1.87 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD1 | 4 | 1.87 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD2 | 4 | 1.87 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD1 | 4 | 1.87 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD2 | 4 | 1.87 |
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 18 | 1.87 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG21 | 6 | 1.87 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG22 | 6 | 1.87 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG23 | 6 | 1.87 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG21 | 6 | 1.87 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG22 | 6 | 1.87 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG23 | 6 | 1.87 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG21 | 6 | 1.87 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG22 | 6 | 1.87 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG23 | 6 | 1.87 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 14 | 1.87 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 14 | 1.87 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 14 | 1.87 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 19 | 1.87 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 19 | 1.87 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 19 | 1.87 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 6 | 1.87 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 6 | 1.87 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 6 | 1.87 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG21 | 19 | 1.87 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG22 | 19 | 1.87 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG23 | 19 | 1.87 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 11 | 1.87 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 11 | 1.87 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 11 | 1.87 |
| (1,135) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:H | 18 | 1.87 |
| (1,135) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:H | 18 | 1.87 |
| (1,135) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:H | 18 | 1.87 |
| (1,1156) | 1:A:67:SER:H | 1:A:124:LEU:HD11 | 9 | 1.87 |
| (1,1156) | 1:A:67:SER:H | 1:A:124:LEU:HD12 | 9 | 1.87 |
| (1,1156) | 1:A:67:SER:H | 1:A:124:LEU:HD13 | 9 | 1.87 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE1 | 19 | 1.86 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE2 | 19 | 1.86 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE1 | 19 | 1.86 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE2 | 19 | 1.86 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE1 | 19 | 1.86 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE2 | 19 | 1.86 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE1 | 10 | 1.86 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE2 | 10 | 1.86 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE1 | 10 | 1.86 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE2 | 10 | 1.86 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE1 | 10 | 1.86 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE2 | 10 | 1.86 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 8 | 1.86 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 8 | 1.86 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 8 | 1.86 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE2 | 3 | 1.86 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE2 | 3 | 1.86 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE2 | 3 | 1.86 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 14 | 1.86 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 14 | 1.86 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 14 | 1.86 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 14 | 1.86 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 14 | 1.86 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 14 | 1.86 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 14 | 1.86 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 14 | 1.86 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 14 | 1.86 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 11 | 1.86 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 11 | 1.86 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 11 | 1.86 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 11 | 1.86 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 11 | 1.86 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 11 | 1.86 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 11 | 1.86 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 11 | 1.86 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 11 | 1.86 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:H | 4 | 1.86 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:111:LEU:H | 4 | 1.86 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:111:LEU:H | 4 | 1.86 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 12 | 1.86 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 12 | 1.86 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 12 | 1.86 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG11 | 15 | 1.85 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG12 | 15 | 1.85 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG13 | 15 | 1.85 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 11 | 1.85 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 11 | 1.85 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 11 | 1.85 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE1 | 12 | 1.85 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE2 | 12 | 1.85 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE1 | 12 | 1.85 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE2 | 12 | 1.85 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE1 | 12 | 1.85 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE2 | 12 | 1.85 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE1 | 6 | 1.85 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE2 | 6 | 1.85 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE1 | 6 | 1.85 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE2 | 6 | 1.85 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE1 | 6 | 1.85 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE2 | 6 | 1.85 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 8 | 1.85 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 8 | 1.85 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 8 | 1.85 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD1 | 4 | 1.85 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD2 | 4 | 1.85 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD1 | 4 | 1.85 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD2 | 4 | 1.85 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD1 | 4 | 1.85 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD2 | 4 | 1.85 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD1 | 19 | 1.85 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD2 | 19 | 1.85 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD1 | 19 | 1.85 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD2 | 19 | 1.85 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD1 | 19 | 1.85 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD2 | 19 | 1.85 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD1 | 8 | 1.85 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD2 | 8 | 1.85 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD1 | 8 | 1.85 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD2 | 8 | 1.85 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD1 | 8 | 1.85 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD2 | 8 | 1.85 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 4 | 1.85 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 4 | 1.85 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 4 | 1.85 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 8 | 1.85 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 8 | 1.85 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 8 | 1.85 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HA | 6 | 1.85 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HA | 6 | 1.85 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HA | 6 | 1.85 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG11 | 6 | 1.85 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG12 | 6 | 1.85 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG13 | 6 | 1.85 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG11 | 6 | 1.85 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG12 | 6 | 1.85 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG13 | 6 | 1.85 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG11 | 6 | 1.85 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG12 | 6 | 1.85 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG13 | 6 | 1.85 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG11 | 16 | 1.85 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG12 | 16 | 1.85 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG13 | 16 | 1.85 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 17 | 1.85 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 17 | 1.85 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 17 | 1.85 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 17 | 1.85 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 17 | 1.85 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 17 | 1.85 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 17 | 1.85 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 17 | 1.85 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 17 | 1.85 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 1 | 1.84 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 1 | 1.84 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 1 | 1.84 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 18 | 1.84 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 18 | 1.84 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 18 | 1.84 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 1.84 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 1.84 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 1.84 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 1.84 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 1.84 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 1.84 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 9 | 1.84 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 9 | 1.84 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 9 | 1.84 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 9 | 1.84 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 9 | 1.84 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 9 | 1.84 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 20 | 1.84 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 20 | 1.84 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 20 | 1.84 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 20 | 1.84 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 20 | 1.84 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 20 | 1.84 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 9 | 1.84 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 9 | 1.84 |
| (1,3639) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 9 | 1.84 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 9 | 1.84 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 9 | 1.84 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 9 | 1.84 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB2 | 8 | 1.84 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB2 | 8 | 1.84 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB2 | 8 | 1.84 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 1 | 1.84 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 1 | 1.84 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 1 | 1.84 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG11 | 10 | 1.84 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG12 | 10 | 1.84 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG13 | 10 | 1.84 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG11 | 10 | 1.84 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG12 | 10 | 1.84 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG13 | 10 | 1.84 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG11 | 10 | 1.84 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG12 | 10 | 1.84 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG13 | 10 | 1.84 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG11 | 16 | 1.84 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG12 | 16 | 1.84 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG13 | 16 | 1.84 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG11 | 16 | 1.84 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG12 | 16 | 1.84 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG13 | 16 | 1.84 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG11 | 16 | 1.84 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG12 | 16 | 1.84 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG13 | 16 | 1.84 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG21 | 1 | 1.84 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG22 | 1 | 1.84 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG23 | 1 | 1.84 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG21 | 20 | 1.84 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG22 | 20 | 1.84 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG23 | 20 | 1.84 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 3 | 1.84 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 3 | 1.84 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 3 | 1.84 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:H | 11 | 1.84 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 11 | 1.84 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:H | 11 | 1.84 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:H | 9 | 1.84 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:111:LEU:H | 9 | 1.84 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:111:LEU:H | 9 | 1.84 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 1 | 1.84 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 1 | 1.84 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 1 | 1.84 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 10 | 1.83 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 12 | 1.83 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 12 | 1.83 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 12 | 1.83 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 12 | 1.83 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 12 | 1.83 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 12 | 1.83 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 12 | 1.83 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 12 | 1.83 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 12 | 1.83 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 7 | 1.83 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 7 | 1.83 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 7 | 1.83 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 1.82 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 1.82 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 1.82 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 1.82 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 1.82 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 1.82 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD1 | 8 | 1.82 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD2 | 8 | 1.82 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD1 | 8 | 1.82 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD2 | 8 | 1.82 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD1 | 8 | 1.82 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD2 | 8 | 1.82 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:HB | 7 | 1.82 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:HB | 7 | 1.82 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:HB | 7 | 1.82 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:111:LEU:HD11 | 10 | 1.82 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:111:LEU:HD12 | 10 | 1.82 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:111:LEU:HD13 | 10 | 1.82 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:111:LEU:HD11 | 10 | 1.82 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:111:LEU:HD12 | 10 | 1.82 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:111:LEU:HD13 | 10 | 1.82 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 5 | 1.82 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 5 | 1.82 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 5 | 1.82 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 16 | 1.82 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 16 | 1.82 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 16 | 1.82 |
| (1,1827) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:29:ASP:HB3 | 3 | 1.82 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 10 | 1.82 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 10 | 1.82 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 10 | 1.82 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 10 | 1.82 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 10 | 1.82 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 10 | 1.82 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 10 | 1.82 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 10 | 1.82 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 10 | 1.82 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 14 | 1.82 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 14 | 1.82 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 14 | 1.82 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:155:LYS:H | 5 | 1.82 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:155:LYS:H | 5 | 1.82 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:155:LYS:H | 5 | 1.82 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:H | 9 | 1.82 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:H | 9 | 1.82 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:H | 9 | 1.82 |
| (1,732) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:130:THR:H | 10 | 1.81 |
| (1,732) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:130:THR:H | 10 | 1.81 |
| (1,732) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:130:THR:H | 10 | 1.81 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 8 | 1.81 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 8 | 1.81 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 8 | 1.81 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD1 | 6 | 1.81 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD2 | 6 | 1.81 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD1 | 6 | 1.81 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD2 | 6 | 1.81 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD1 | 6 | 1.81 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD2 | 6 | 1.81 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD1 | 10 | 1.81 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD2 | 10 | 1.81 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD1 | 10 | 1.81 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD2 | 10 | 1.81 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD1 | 10 | 1.81 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD2 | 10 | 1.81 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD1 | 17 | 1.81 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD2 | 17 | 1.81 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD1 | 17 | 1.81 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD2 | 17 | 1.81 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD1 | 17 | 1.81 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD2 | 17 | 1.81 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 2 | 1.81 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 2 | 1.81 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 2 | 1.81 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 2 | 1.81 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 2 | 1.81 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 2 | 1.81 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 3 | 1.81 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 3 | 1.81 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 3 | 1.81 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 11 | 1.81 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 11 | 1.81 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 11 | 1.81 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 17 | 1.81 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 17 | 1.81 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 17 | 1.81 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 20 | 1.81 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 20 | 1.81 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 20 | 1.81 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 20 | 1.81 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 20 | 1.81 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 20 | 1.81 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 20 | 1.81 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 20 | 1.81 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 20 | 1.81 |
| (1,2373) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HA | 15 | 1.81 |
| (1,2373) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HA | 15 | 1.81 |
| (1,2373) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HA | 15 | 1.81 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 16 | 1.81 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 16 | 1.81 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 16 | 1.81 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 16 | 1.81 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 16 | 1.81 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 16 | 1.81 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 16 | 1.81 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 16 | 1.81 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 16 | 1.81 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 14 | 1.81 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 14 | 1.81 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 14 | 1.81 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 13 | 1.81 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 13 | 1.81 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 13 | 1.81 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG21 | 10 | 1.81 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG22 | 10 | 1.81 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG23 | 10 | 1.81 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG21 | 10 | 1.81 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG22 | 10 | 1.81 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG23 | 10 | 1.81 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG21 | 10 | 1.81 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG22 | 10 | 1.81 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG23 | 10 | 1.81 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 7 | 1.81 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 7 | 1.81 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 7 | 1.81 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 7 | 1.81 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 7 | 1.81 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 7 | 1.81 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 7 | 1.81 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 7 | 1.81 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 7 | 1.81 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:H | 16 | 1.81 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:H | 16 | 1.81 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:H | 16 | 1.81 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE1 | 5 | 1.8 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE2 | 5 | 1.8 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE1 | 5 | 1.8 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE2 | 5 | 1.8 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE1 | 5 | 1.8 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE2 | 5 | 1.8 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 1.8 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 1.8 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 1.8 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 1.8 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 1.8 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 1.8 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 17 | 1.8 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 17 | 1.8 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 17 | 1.8 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 17 | 1.8 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 17 | 1.8 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 17 | 1.8 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 1.8 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 1.8 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 1.8 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 11 | 1.8 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 11 | 1.8 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 11 | 1.8 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 17 | 1.8 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 17 | 1.8 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 17 | 1.8 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 1 | 1.8 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 1 | 1.8 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 1 | 1.8 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HA | 18 | 1.8 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HA | 18 | 1.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HA | 18 | 1.8 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 13 | 1.8 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 13 | 1.8 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 13 | 1.8 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 5 | 1.8 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 5 | 1.8 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 5 | 1.8 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 11 | 1.8 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 11 | 1.8 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 11 | 1.8 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 19 | 1.8 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 19 | 1.8 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 19 | 1.8 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 1.8 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 1.8 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 1.8 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 1.8 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 1.8 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 1.8 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 1.8 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 1.8 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 1.8 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE22 | 3 | 1.8 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE22 | 3 | 1.8 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE22 | 3 | 1.8 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE22 | 20 | 1.8 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE22 | 20 | 1.8 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE22 | 20 | 1.8 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG11 | 13 | 1.79 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG12 | 13 | 1.79 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG13 | 13 | 1.79 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 7 | 1.79 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 7 | 1.79 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 7 | 1.79 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 10 | 1.79 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 10 | 1.79 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 10 | 1.79 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 4 | 1.79 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD1 | 8 | 1.79 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD2 | 8 | 1.79 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD1 | 8 | 1.79 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD2 | 8 | 1.79 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD1 | 8 | 1.79 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD2 | 8 | 1.79 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 10 | 1.79 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 10 | 1.79 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 10 | 1.79 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE3 | 7 | 1.79 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE3 | 7 | 1.79 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE3 | 7 | 1.79 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE3 | 14 | 1.79 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE3 | 14 | 1.79 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE3 | 14 | 1.79 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 7 | 1.79 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 7 | 1.79 |
| (1,3548) | 1:A:16:VAL:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 7 | 1.79 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 2 | 1.79 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 2 | 1.79 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 2 | 1.79 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 16 | 1.79 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 16 | 1.79 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 16 | 1.79 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 14 | 1.79 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 14 | 1.79 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 14 | 1.79 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 7 | 1.79 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 7 | 1.79 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 7 | 1.79 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG11 | 20 | 1.79 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG12 | 20 | 1.79 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG13 | 20 | 1.79 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:H | 11 | 1.79 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:H | 11 | 1.79 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:H | 11 | 1.79 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 6 | 1.79 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 6 | 1.79 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 6 | 1.79 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 12 | 1.79 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 12 | 1.79 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 12 | 1.79 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 17 | 1.79 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 17 | 1.79 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 17 | 1.79 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:155:LYS:H | 15 | 1.79 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:155:LYS:H | 15 | 1.79 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:155:LYS:H | 15 | 1.79 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:HA | 12 | 1.79 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:HA | 12 | 1.79 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:HA | 12 | 1.79 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 1 | 1.79 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 1 | 1.79 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 1 | 1.79 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 16 | 1.78 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 16 | 1.78 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 16 | 1.78 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 1.78 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 1.78 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 1.78 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 1.78 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 1.78 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 1.78 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD1 | 3 | 1.78 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD2 | 3 | 1.78 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD1 | 3 | 1.78 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD2 | 3 | 1.78 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD1 | 3 | 1.78 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD2 | 3 | 1.78 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD1 | 13 | 1.78 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD2 | 13 | 1.78 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD1 | 13 | 1.78 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD2 | 13 | 1.78 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD1 | 13 | 1.78 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD2 | 13 | 1.78 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 13 | 1.78 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 13 | 1.78 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 13 | 1.78 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:HB | 14 | 1.78 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:HB | 14 | 1.78 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:HB | 14 | 1.78 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HA | 11 | 1.78 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HA | 11 | 1.78 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HA | 11 | 1.78 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG11 | 12 | 1.78 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG12 | 12 | 1.78 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG13 | 12 | 1.78 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG11 | 12 | 1.78 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG12 | 12 | 1.78 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG13 | 12 | 1.78 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG11 | 12 | 1.78 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG12 | 12 | 1.78 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG13 | 12 | 1.78 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 5 | 1.78 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 5 | 1.78 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 5 | 1.78 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 18 | 1.78 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 18 | 1.78 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 18 | 1.78 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 1 | 1.78 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 1 | 1.78 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 1 | 1.78 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 18 | 1.78 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 18 | 1.78 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 18 | 1.78 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE1 | 3 | 1.77 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE2 | 3 | 1.77 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE1 | 3 | 1.77 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE2 | 3 | 1.77 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE1 | 3 | 1.77 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE2 | 3 | 1.77 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 9 | 1.77 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 18 | 1.77 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 1.77 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 1.77 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 1.77 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 1.77 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 1.77 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 1.77 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 19 | 1.77 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 19 | 1.77 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 19 | 1.77 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 19 | 1.77 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 19 | 1.77 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 19 | 1.77 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 15 | 1.77 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 15 | 1.77 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 15 | 1.77 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 4 | 1.77 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 4 | 1.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 4 | 1.77 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:H | 11 | 1.77 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:111:LEU:H | 11 | 1.77 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:111:LEU:H | 11 | 1.77 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE22 | 11 | 1.77 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE22 | 11 | 1.77 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE22 | 11 | 1.77 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 10 | 1.77 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 10 | 1.77 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 10 | 1.77 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 20 | 1.76 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD1 | 10 | 1.76 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD2 | 10 | 1.76 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD1 | 10 | 1.76 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD2 | 10 | 1.76 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD1 | 10 | 1.76 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD2 | 10 | 1.76 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 19 | 1.76 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 19 | 1.76 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 19 | 1.76 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 19 | 1.76 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 19 | 1.76 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 19 | 1.76 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:HB | 5 | 1.76 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:HB | 5 | 1.76 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:HB | 5 | 1.76 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG21 | 3 | 1.76 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG22 | 3 | 1.76 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG23 | 3 | 1.76 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG21 | 3 | 1.76 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG22 | 3 | 1.76 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG23 | 3 | 1.76 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG21 | 3 | 1.76 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG22 | 3 | 1.76 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG23 | 3 | 1.76 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 17 | 1.76 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 17 | 1.76 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 17 | 1.76 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG11 | 6 | 1.76 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG12 | 6 | 1.76 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG13 | 6 | 1.76 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 1.76 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 1.76 |
| (1,1519) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 1.76 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:H | 19 | 1.76 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:H | 19 | 1.76 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:H | 19 | 1.76 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 3 | 1.76 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 3 | 1.76 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 3 | 1.76 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 5 | 1.75 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 5 | 1.75 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 5 | 1.75 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 9 | 1.75 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 9 | 1.75 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 9 | 1.75 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 7 | 1.75 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 7 | 1.75 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 7 | 1.75 |
| (1,1939) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HB3 | 15 | 1.75 |
| (1,1939) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HB3 | 15 | 1.75 |
| (1,1939) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HB3 | 15 | 1.75 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 15 | 1.75 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 15 | 1.75 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 15 | 1.75 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 15 | 1.75 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 15 | 1.75 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 15 | 1.75 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 15 | 1.75 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 15 | 1.75 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 15 | 1.75 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 3 | 1.75 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 3 | 1.75 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 3 | 1.75 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 6 | 1.75 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 6 | 1.75 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 6 | 1.75 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 12 | 1.75 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 12 | 1.75 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 12 | 1.75 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 19 | 1.74 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 19 | 1.74 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 19 | 1.74 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 20 | 1.74 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 20 | 1.74 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 20 | 1.74 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 15 | 1.74 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 1.74 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 1.74 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 1.74 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 1.74 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 1.74 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 1.74 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD1 | 2 | 1.74 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD2 | 2 | 1.74 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD1 | 2 | 1.74 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD2 | 2 | 1.74 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD1 | 2 | 1.74 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD2 | 2 | 1.74 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:111:LEU:HD11 | 18 | 1.74 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:111:LEU:HD12 | 18 | 1.74 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:111:LEU:HD13 | 18 | 1.74 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:111:LEU:HD11 | 18 | 1.74 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:111:LEU:HD12 | 18 | 1.74 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:111:LEU:HD13 | 18 | 1.74 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 8 | 1.74 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 8 | 1.74 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 8 | 1.74 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 8 | 1.74 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 8 | 1.74 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 8 | 1.74 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 1 | 1.74 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 1 | 1.74 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 1 | 1.74 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 1 | 1.74 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 1 | 1.74 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 1 | 1.74 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 6 | 1.74 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 1.74 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 1.74 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 1.74 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG21 | 10 | 1.74 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG22 | 10 | 1.74 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG23 | 10 | 1.74 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG21 | 10 | 1.74 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG22 | 10 | 1.74 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG23 | 10 | 1.74 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG21 | 10 | 1.74 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG22 | 10 | 1.74 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG23 | 10 | 1.74 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG21 | 14 | 1.74 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG22 | 14 | 1.74 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG23 | 14 | 1.74 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG21 | 14 | 1.74 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG22 | 14 | 1.74 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG23 | 14 | 1.74 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG21 | 14 | 1.74 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG22 | 14 | 1.74 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG23 | 14 | 1.74 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG11 | 7 | 1.74 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG12 | 7 | 1.74 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG13 | 7 | 1.74 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG11 | 20 | 1.74 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG12 | 20 | 1.74 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG13 | 20 | 1.74 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 7 | 1.74 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 7 | 1.74 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 7 | 1.74 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 7 | 1.74 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 7 | 1.74 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 7 | 1.74 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 7 | 1.74 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 7 | 1.74 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 7 | 1.74 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 10 | 1.74 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 10 | 1.74 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 10 | 1.74 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 14 | 1.74 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 14 | 1.74 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 14 | 1.74 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:HA | 16 | 1.74 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:HA | 16 | 1.74 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:HA | 16 | 1.74 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:H | 2 | 1.74 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 2 | 1.74 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:H | 2 | 1.74 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 3 | 1.73 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 3 | 1.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 3 | 1.73 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 19 | 1.73 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 19 | 1.73 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 19 | 1.73 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 3 | 1.73 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 3 | 1.73 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 3 | 1.73 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 2 | 1.73 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 3 | 1.73 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE3 | 20 | 1.73 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE3 | 20 | 1.73 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE3 | 20 | 1.73 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:HB | 11 | 1.73 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:HB | 11 | 1.73 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:HB | 11 | 1.73 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:HB | 17 | 1.73 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:HB | 17 | 1.73 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:HB | 17 | 1.73 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 20 | 1.73 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 1.73 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 1.73 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 1.73 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 13 | 1.73 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 13 | 1.73 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 13 | 1.73 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 13 | 1.73 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 13 | 1.73 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 13 | 1.73 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 13 | 1.73 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 13 | 1.73 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 13 | 1.73 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 1 | 1.73 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 1 | 1.73 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 1 | 1.73 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 1 | 1.73 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 1 | 1.73 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 1 | 1.73 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 6 | 1.73 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 6 | 1.73 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 6 | 1.73 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 7 | 1.73 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 7 | 1.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 7 | 1.73 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 7 | 1.73 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 7 | 1.73 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 7 | 1.73 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 7 | 1.73 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 7 | 1.73 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 7 | 1.73 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG11 | 4 | 1.73 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG12 | 4 | 1.73 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG13 | 4 | 1.73 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG21 | 13 | 1.73 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG22 | 13 | 1.73 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG23 | 13 | 1.73 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 14 | 1.73 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 14 | 1.73 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 14 | 1.73 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 14 | 1.73 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 14 | 1.73 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 14 | 1.73 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 14 | 1.73 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 14 | 1.73 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 14 | 1.73 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 9 | 1.73 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 9 | 1.73 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 9 | 1.73 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 14 | 1.73 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 14 | 1.73 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 14 | 1.73 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:H | 19 | 1.73 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 19 | 1.73 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:H | 19 | 1.73 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:H | 1 | 1.73 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:111:LEU:H | 1 | 1.73 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:111:LEU:H | 1 | 1.73 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 15 | 1.73 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 15 | 1.73 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 15 | 1.73 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 13 | 1.73 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 13 | 1.73 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 13 | 1.73 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 20 | 1.73 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 20 | 1.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 20 | 1.73 |
| (1,708) | 1:A:66:ALA:H | 1:A:124:LEU:HD11 | 18 | 1.72 |
| (1,708) | 1:A:66:ALA:H | 1:A:124:LEU:HD12 | 18 | 1.72 |
| (1,708) | 1:A:66:ALA:H | 1:A:124:LEU:HD13 | 18 | 1.72 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 12 | 1.72 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 16 | 1.72 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE3 | 17 | 1.72 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE3 | 17 | 1.72 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE3 | 17 | 1.72 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:HB | 3 | 1.72 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:HB | 3 | 1.72 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:HB | 3 | 1.72 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 18 | 1.72 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 18 | 1.72 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 18 | 1.72 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 11 | 1.72 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 5 | 1.72 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 5 | 1.72 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 5 | 1.72 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 7 | 1.72 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 7 | 1.72 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 7 | 1.72 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 10 | 1.72 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 10 | 1.72 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 10 | 1.72 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 7 | 1.72 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 7 | 1.72 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 7 | 1.72 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 16 | 1.72 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 16 | 1.72 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 16 | 1.72 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 16 | 1.72 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 16 | 1.72 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 16 | 1.72 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 16 | 1.72 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 16 | 1.72 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 16 | 1.72 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG11 | 20 | 1.72 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG12 | 20 | 1.72 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG13 | 20 | 1.72 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 4 | 1.72 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 4 | 1.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 4 | 1.72 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 7 | 1.72 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 7 | 1.72 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 7 | 1.72 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:H | 20 | 1.72 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 20 | 1.72 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:H | 20 | 1.72 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 14 | 1.71 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 14 | 1.71 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 14 | 1.71 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 14 | 1.71 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 14 | 1.71 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 14 | 1.71 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 19 | 1.71 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 1.71 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 1.71 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 1.71 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 1.71 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 1.71 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 1.71 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 16 | 1.71 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 16 | 1.71 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 16 | 1.71 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 16 | 1.71 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 16 | 1.71 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 16 | 1.71 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG21 | 14 | 1.71 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG22 | 14 | 1.71 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG23 | 14 | 1.71 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG21 | 17 | 1.71 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG22 | 17 | 1.71 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG23 | 17 | 1.71 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 20 | 1.71 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 20 | 1.71 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 20 | 1.71 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 14 | 1.71 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 1.71 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 1.71 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 1.71 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HA | 8 | 1.71 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HA | 8 | 1.71 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HA | 8 | 1.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 12 | 1.71 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 12 | 1.71 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 12 | 1.71 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 17 | 1.71 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 17 | 1.71 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 17 | 1.71 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 7 | 1.71 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 7 | 1.71 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 7 | 1.71 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 7 | 1.71 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 7 | 1.71 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 7 | 1.71 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 7 | 1.71 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 7 | 1.71 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 7 | 1.71 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG2 | 15 | 1.71 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG3 | 15 | 1.71 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG2 | 15 | 1.71 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG3 | 15 | 1.71 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 15 | 1.71 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 15 | 1.71 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB2 | 19 | 1.71 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB2 | 19 | 1.71 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB2 | 19 | 1.71 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 16 | 1.7 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 16 | 1.7 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 16 | 1.7 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 5 | 1.7 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 5 | 1.7 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 5 | 1.7 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE1 | 11 | 1.7 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE2 | 11 | 1.7 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE1 | 11 | 1.7 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE2 | 11 | 1.7 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE1 | 11 | 1.7 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE2 | 11 | 1.7 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 3 | 1.7 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 5 | 1.7 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 8 | 1.7 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 1.7 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 1.7 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 1.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 14 | 1.7 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 14 | 1.7 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 14 | 1.7 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 5 | 1.7 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 5 | 1.7 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 5 | 1.7 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 5 | 1.7 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 5 | 1.7 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 5 | 1.7 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 5 | 1.7 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 5 | 1.7 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 5 | 1.7 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:H | 2 | 1.7 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:H | 2 | 1.7 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:H | 2 | 1.7 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 2 | 1.7 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 2 | 1.7 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 2 | 1.7 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 8 | 1.7 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 8 | 1.7 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 8 | 1.7 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 12 | 1.7 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 12 | 1.7 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 12 | 1.7 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 9 | 1.7 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 9 | 1.7 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 9 | 1.7 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:H | 13 | 1.7 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:H | 13 | 1.7 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:H | 13 | 1.7 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 17 | 1.7 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 17 | 1.7 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 17 | 1.7 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 19 | 1.7 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 19 | 1.7 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 19 | 1.7 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG11 | 19 | 1.69 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG12 | 19 | 1.69 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG13 | 19 | 1.69 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 4 | 1.69 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 4 | 1.69 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 4 | 1.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 13 | 1.69 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 13 | 1.69 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 13 | 1.69 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD1 | 11 | 1.69 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD2 | 11 | 1.69 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD1 | 11 | 1.69 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD2 | 11 | 1.69 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD1 | 11 | 1.69 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD2 | 11 | 1.69 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD1 | 18 | 1.69 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD2 | 18 | 1.69 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD1 | 18 | 1.69 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD2 | 18 | 1.69 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD1 | 18 | 1.69 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD2 | 18 | 1.69 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 1 | 1.69 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 1 | 1.69 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 1 | 1.69 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 11 | 1.69 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 11 | 1.69 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 11 | 1.69 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 11 | 1.69 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 11 | 1.69 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 11 | 1.69 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE3 | 4 | 1.69 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE3 | 4 | 1.69 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE3 | 4 | 1.69 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:HB | 1 | 1.69 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:HB | 1 | 1.69 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:HB | 1 | 1.69 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:HB | 19 | 1.69 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:HB | 19 | 1.69 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:HB | 19 | 1.69 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:HB | 20 | 1.69 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:HB | 20 | 1.69 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:HB | 20 | 1.69 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:111:LEU:HD11 | 19 | 1.69 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:111:LEU:HD12 | 19 | 1.69 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:111:LEU:HD13 | 19 | 1.69 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:111:LEU:HD11 | 19 | 1.69 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:111:LEU:HD12 | 19 | 1.69 |
| (1,3715) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:111:LEU:HD13 | 19 | 1.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 13 | 1.69 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 13 | 1.69 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 13 | 1.69 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HB | 10 | 1.69 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HB | 10 | 1.69 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HB | 10 | 1.69 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE2 | 2 | 1.69 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE2 | 2 | 1.69 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE2 | 2 | 1.69 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 4 | 1.69 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB1 | 18 | 1.69 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB2 | 18 | 1.69 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:HB3 | 18 | 1.69 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB1 | 18 | 1.69 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB2 | 18 | 1.69 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:HB3 | 18 | 1.69 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB1 | 18 | 1.69 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB2 | 18 | 1.69 |
| (1,2418) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:HB3 | 18 | 1.69 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 2 | 1.69 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 2 | 1.69 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 2 | 1.69 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 7 | 1.69 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 7 | 1.69 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 7 | 1.69 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG11 | 2 | 1.69 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG12 | 2 | 1.69 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG13 | 2 | 1.69 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG11 | 2 | 1.69 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG12 | 2 | 1.69 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG13 | 2 | 1.69 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG11 | 2 | 1.69 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG12 | 2 | 1.69 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG13 | 2 | 1.69 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 14 | 1.69 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 14 | 1.69 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 14 | 1.69 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 6 | 1.69 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 6 | 1.69 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 6 | 1.69 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 6 | 1.69 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 6 | 1.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 6 | 1.69 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 8 | 1.69 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 8 | 1.69 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 8 | 1.69 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 14 | 1.69 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 14 | 1.69 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 14 | 1.69 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 16 | 1.69 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 16 | 1.69 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 16 | 1.69 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:155:LYS:H | 8 | 1.69 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:155:LYS:H | 8 | 1.69 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:155:LYS:H | 8 | 1.69 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 15 | 1.69 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 15 | 1.69 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 15 | 1.69 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG11 | 5 | 1.68 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG12 | 5 | 1.68 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG13 | 5 | 1.68 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 2 | 1.68 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 2 | 1.68 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 2 | 1.68 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD1 | 5 | 1.68 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD2 | 5 | 1.68 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD1 | 5 | 1.68 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD2 | 5 | 1.68 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD1 | 5 | 1.68 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD2 | 5 | 1.68 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD1 | 9 | 1.68 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD2 | 9 | 1.68 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD1 | 9 | 1.68 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD2 | 9 | 1.68 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD1 | 9 | 1.68 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD2 | 9 | 1.68 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 4 | 1.68 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 20 | 1.68 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 20 | 1.68 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 20 | 1.68 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 19 | 1.68 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 19 | 1.68 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 19 | 1.68 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 19 | 1.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 19 | 1.68 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 19 | 1.68 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 19 | 1.68 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 19 | 1.68 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 19 | 1.68 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:H | 11 | 1.68 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:H | 11 | 1.68 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:H | 11 | 1.68 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 1 | 1.68 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 1 | 1.68 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 1 | 1.68 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 4 | 1.68 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 4 | 1.68 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 4 | 1.68 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 15 | 1.68 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 15 | 1.68 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 15 | 1.68 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:H | 2 | 1.68 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:H | 2 | 1.68 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:H | 2 | 1.68 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:H | 3 | 1.68 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:H | 3 | 1.68 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:H | 3 | 1.68 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 17 | 1.67 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 17 | 1.67 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 17 | 1.67 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE1 | 16 | 1.67 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE2 | 16 | 1.67 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE1 | 16 | 1.67 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE2 | 16 | 1.67 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE1 | 16 | 1.67 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE2 | 16 | 1.67 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 1.67 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 1.67 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 1.67 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 1.67 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 1.67 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 1.67 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 1.67 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 1.67 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 1.67 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 1.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 1.67 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 1.67 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 12 | 1.67 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 1.67 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 1.67 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 1.67 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HA | 13 | 1.67 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HA | 13 | 1.67 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HA | 13 | 1.67 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HA | 17 | 1.67 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HA | 17 | 1.67 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HA | 17 | 1.67 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 2 | 1.67 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 2 | 1.67 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 2 | 1.67 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 3 | 1.67 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 3 | 1.67 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 3 | 1.67 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 15 | 1.67 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 15 | 1.67 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 15 | 1.67 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 18 | 1.67 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 18 | 1.67 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 18 | 1.67 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 14 | 1.67 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 14 | 1.67 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 14 | 1.67 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 16 | 1.67 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 16 | 1.67 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 16 | 1.67 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 19 | 1.67 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 19 | 1.67 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 19 | 1.67 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 19 | 1.67 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 19 | 1.67 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 19 | 1.67 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 19 | 1.67 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 19 | 1.67 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 19 | 1.67 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 1 | 1.67 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 1 | 1.67 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 1 | 1.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 17 | 1.67 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 17 | 1.67 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 17 | 1.67 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 1 | 1.67 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 1 | 1.67 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 1 | 1.67 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 11 | 1.66 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 11 | 1.66 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 11 | 1.66 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 10 | 1.66 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD1 | 2 | 1.66 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD2 | 2 | 1.66 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD1 | 2 | 1.66 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD2 | 2 | 1.66 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD1 | 2 | 1.66 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD2 | 2 | 1.66 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 14 | 1.66 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 14 | 1.66 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 14 | 1.66 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 14 | 1.66 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 14 | 1.66 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 14 | 1.66 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG11 | 9 | 1.66 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG12 | 9 | 1.66 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG13 | 9 | 1.66 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG11 | 19 | 1.66 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG12 | 19 | 1.66 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG13 | 19 | 1.66 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 19 | 1.66 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 19 | 1.66 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 19 | 1.66 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE2 | 9 | 1.66 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE2 | 9 | 1.66 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE2 | 9 | 1.66 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 19 | 1.66 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 1.66 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 1.66 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 1.66 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 9 | 1.66 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 9 | 1.66 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 9 | 1.66 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG11 | 19 | 1.66 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG12 | 19 | 1.66 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG13 | 19 | 1.66 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG11 | 19 | 1.66 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG12 | 19 | 1.66 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG13 | 19 | 1.66 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG11 | 19 | 1.66 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG12 | 19 | 1.66 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG13 | 19 | 1.66 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 4 | 1.66 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 4 | 1.66 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 4 | 1.66 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 13 | 1.66 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 13 | 1.66 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 13 | 1.66 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 19 | 1.66 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 19 | 1.66 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 19 | 1.66 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:155:LYS:H | 19 | 1.66 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:155:LYS:H | 19 | 1.66 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:155:LYS:H | 19 | 1.66 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:HA | 11 | 1.66 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:HA | 11 | 1.66 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:HA | 11 | 1.66 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 1.65 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 1.65 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 1.65 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 1.65 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 1.65 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 1.65 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD1 | 17 | 1.65 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD2 | 17 | 1.65 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD1 | 17 | 1.65 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD2 | 17 | 1.65 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD1 | 17 | 1.65 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD2 | 17 | 1.65 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD1 | 6 | 1.65 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD2 | 6 | 1.65 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD1 | 6 | 1.65 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD2 | 6 | 1.65 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD1 | 6 | 1.65 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD2 | 6 | 1.65 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 12 | 1.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE3 | 3 | 1.65 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE3 | 3 | 1.65 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE3 | 3 | 1.65 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE3 | 11 | 1.65 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE3 | 11 | 1.65 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE3 | 11 | 1.65 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:HB | 6 | 1.65 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:HB | 6 | 1.65 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:HB | 6 | 1.65 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:HB | 13 | 1.65 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:HB | 13 | 1.65 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:HB | 13 | 1.65 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 11 | 1.65 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 11 | 1.65 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 11 | 1.65 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 14 | 1.65 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 14 | 1.65 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 14 | 1.65 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 10 | 1.65 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 10 | 1.65 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 10 | 1.65 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG11 | 14 | 1.65 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG12 | 14 | 1.65 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG13 | 14 | 1.65 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 9 | 1.65 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 9 | 1.65 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 9 | 1.65 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 9 | 1.65 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 9 | 1.65 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 9 | 1.65 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 9 | 1.65 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 9 | 1.65 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 9 | 1.65 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 13 | 1.65 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 13 | 1.65 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 13 | 1.65 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 13 | 1.65 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 13 | 1.65 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 13 | 1.65 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 13 | 1.65 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 13 | 1.65 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 13 | 1.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:H | 8 | 1.65 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:H | 8 | 1.65 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:H | 8 | 1.65 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 18 | 1.65 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 18 | 1.65 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 18 | 1.65 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 3 | 1.65 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 3 | 1.65 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 3 | 1.65 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 7 | 1.65 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 7 | 1.65 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 7 | 1.65 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 16 | 1.65 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 16 | 1.65 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 16 | 1.65 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 2 | 1.65 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 2 | 1.65 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 2 | 1.65 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:H | 15 | 1.65 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 15 | 1.65 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:H | 15 | 1.65 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 18 | 1.65 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 18 | 1.65 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 18 | 1.65 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 3 | 1.64 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 3 | 1.64 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 3 | 1.64 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 14 | 1.64 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 14 | 1.64 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 14 | 1.64 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 15 | 1.64 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 15 | 1.64 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 15 | 1.64 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 5 | 1.64 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD1 | 7 | 1.64 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD2 | 7 | 1.64 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD1 | 7 | 1.64 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD2 | 7 | 1.64 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD1 | 7 | 1.64 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD2 | 7 | 1.64 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 14 | 1.64 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 14 | 1.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 14 | 1.64 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 14 | 1.64 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 14 | 1.64 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 14 | 1.64 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 19 | 1.64 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 19 | 1.64 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 19 | 1.64 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 19 | 1.64 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 19 | 1.64 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 19 | 1.64 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG11 | 14 | 1.64 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG12 | 14 | 1.64 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG13 | 14 | 1.64 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 6 | 1.64 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 6 | 1.64 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 6 | 1.64 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 18 | 1.64 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG21 | 2 | 1.64 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG22 | 2 | 1.64 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG23 | 2 | 1.64 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG21 | 2 | 1.64 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG22 | 2 | 1.64 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG23 | 2 | 1.64 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG21 | 2 | 1.64 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG22 | 2 | 1.64 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG23 | 2 | 1.64 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 13 | 1.64 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 13 | 1.64 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 13 | 1.64 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 4 | 1.64 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 4 | 1.64 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 4 | 1.64 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 9 | 1.64 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 9 | 1.64 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 9 | 1.64 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 13 | 1.64 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 13 | 1.64 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 13 | 1.64 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG11 | 1 | 1.64 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG12 | 1 | 1.64 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG13 | 1 | 1.64 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG11 | 1 | 1.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG12 | 1 | 1.64 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG13 | 1 | 1.64 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG11 | 1 | 1.64 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG12 | 1 | 1.64 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG13 | 1 | 1.64 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG11 | 17 | 1.64 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG12 | 17 | 1.64 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG13 | 17 | 1.64 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG11 | 17 | 1.64 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG12 | 17 | 1.64 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG13 | 17 | 1.64 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG11 | 17 | 1.64 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG12 | 17 | 1.64 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG13 | 17 | 1.64 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:155:LYS:H | 11 | 1.64 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:155:LYS:H | 11 | 1.64 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:155:LYS:H | 11 | 1.64 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:H | 20 | 1.64 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:H | 20 | 1.64 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:H | 20 | 1.64 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 17 | 1.64 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 17 | 1.64 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 17 | 1.64 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD1 | 5 | 1.63 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD2 | 5 | 1.63 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD1 | 5 | 1.63 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD2 | 5 | 1.63 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD1 | 5 | 1.63 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD2 | 5 | 1.63 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD1 | 15 | 1.63 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD2 | 15 | 1.63 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD1 | 15 | 1.63 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD2 | 15 | 1.63 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD1 | 15 | 1.63 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD2 | 15 | 1.63 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 18 | 1.63 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 18 | 1.63 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 18 | 1.63 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 18 | 1.63 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 18 | 1.63 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 18 | 1.63 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG21 | 16 | 1.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG22 | 16 | 1.63 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG23 | 16 | 1.63 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 8 | 1.63 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 8 | 1.63 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 8 | 1.63 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE2 | 1 | 1.63 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE2 | 1 | 1.63 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE2 | 1 | 1.63 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 9 | 1.63 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 13 | 1.63 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 13 | 1.63 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 13 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG11 | 9 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG12 | 9 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG13 | 9 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG11 | 9 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG12 | 9 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG13 | 9 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 9 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 9 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG13 | 9 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG11 | 12 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG12 | 12 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG13 | 12 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG11 | 12 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG12 | 12 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG13 | 12 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 12 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 12 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG13 | 12 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG11 | 14 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG12 | 14 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG13 | 14 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG11 | 14 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG12 | 14 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG13 | 14 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 14 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 14 | 1.63 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG13 | 14 | 1.63 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 1.63 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 1.63 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 1.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG11 | 14 | 1.63 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG12 | 14 | 1.63 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG13 | 14 | 1.63 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG11 | 14 | 1.63 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG12 | 14 | 1.63 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG13 | 14 | 1.63 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG11 | 14 | 1.63 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG12 | 14 | 1.63 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG13 | 14 | 1.63 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG21 | 12 | 1.63 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG22 | 12 | 1.63 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG23 | 12 | 1.63 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG11 | 8 | 1.63 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG12 | 8 | 1.63 |
| (1,2091) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:156:VAL:HG13 | 8 | 1.63 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG11 | 5 | 1.63 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG12 | 5 | 1.63 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG13 | 5 | 1.63 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 5 | 1.63 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 5 | 1.63 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 5 | 1.63 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 16 | 1.63 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 16 | 1.63 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 16 | 1.63 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 3 | 1.63 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 3 | 1.63 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 3 | 1.63 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:H | 3 | 1.63 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:111:LEU:H | 3 | 1.63 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:111:LEU:H | 3 | 1.63 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 1.63 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 1.63 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 1.63 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 15 | 1.63 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 15 | 1.63 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 15 | 1.63 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 15 | 1.63 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 15 | 1.63 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 15 | 1.63 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 15 | 1.63 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 15 | 1.63 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 15 | 1.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:H | 15 | 1.63 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:H | 15 | 1.63 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:H | 15 | 1.63 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 18 | 1.63 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 18 | 1.63 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 18 | 1.63 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 1 | 1.62 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 1 | 1.62 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 1 | 1.62 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 1.62 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 1.62 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 1.62 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 1.62 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 1.62 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 1.62 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 1.62 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 1.62 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 1.62 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 1.62 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 1.62 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 1.62 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 1.62 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 1.62 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 1.62 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 1.62 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 1.62 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 1.62 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 6 | 1.62 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 6 | 1.62 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 6 | 1.62 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 6 | 1.62 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 6 | 1.62 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 6 | 1.62 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 11 | 1.62 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE3 | 9 | 1.62 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE3 | 9 | 1.62 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE3 | 9 | 1.62 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG21 | 5 | 1.62 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG22 | 5 | 1.62 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG23 | 5 | 1.62 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG21 | 20 | 1.62 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG22 | 20 | 1.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG23 | 20 | 1.62 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 1.62 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 1.62 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 1.62 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 3 | 1.62 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 3 | 1.62 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 3 | 1.62 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 9 | 1.62 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 9 | 1.62 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 9 | 1.62 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 6 | 1.62 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 6 | 1.62 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 6 | 1.62 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 9 | 1.62 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 9 | 1.62 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 9 | 1.62 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 9 | 1.62 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 9 | 1.62 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 9 | 1.62 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 9 | 1.62 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 9 | 1.62 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 9 | 1.62 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 6 | 1.62 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 6 | 1.62 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 6 | 1.62 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:155:LYS:H | 2 | 1.62 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:155:LYS:H | 2 | 1.62 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:155:LYS:H | 2 | 1.62 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 1.62 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 1.62 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 1.62 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 1.61 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 1.61 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 1.61 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 1.61 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 1.61 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 1.61 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 10 | 1.61 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 10 | 1.61 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 10 | 1.61 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 10 | 1.61 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 10 | 1.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 10 | 1.61 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 2 | 1.61 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 1.61 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 1.61 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 1.61 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 17 | 1.61 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 17 | 1.61 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 17 | 1.61 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 4 | 1.61 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 4 | 1.61 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 4 | 1.61 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 10 | 1.61 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 10 | 1.61 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 10 | 1.61 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG11 | 6 | 1.61 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG12 | 6 | 1.61 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG13 | 6 | 1.61 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG11 | 6 | 1.61 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG12 | 6 | 1.61 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG13 | 6 | 1.61 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 6 | 1.61 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 6 | 1.61 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG13 | 6 | 1.61 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG11 | 8 | 1.61 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG12 | 8 | 1.61 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG13 | 8 | 1.61 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG11 | 8 | 1.61 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG12 | 8 | 1.61 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG13 | 8 | 1.61 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 8 | 1.61 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 8 | 1.61 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG13 | 8 | 1.61 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 1.61 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 1.61 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 1.61 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 20 | 1.61 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 20 | 1.61 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 20 | 1.61 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 7 | 1.61 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 7 | 1.61 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 7 | 1.61 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:H | 18 | 1.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:H | 18 | 1.61 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:H | 18 | 1.61 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 18 | 1.61 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 18 | 1.61 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 18 | 1.61 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 6 | 1.61 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 6 | 1.61 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 6 | 1.61 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 17 | 1.6 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 17 | 1.6 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 17 | 1.6 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 9 | 1.6 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 9 | 1.6 |
| (1,875) | 1:A:50:SER:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 9 | 1.6 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 7 | 1.6 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 7 | 1.6 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 7 | 1.6 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 12 | 1.6 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 12 | 1.6 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 12 | 1.6 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 12 | 1.6 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 12 | 1.6 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 12 | 1.6 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 16 | 1.6 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 16 | 1.6 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 16 | 1.6 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 16 | 1.6 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 16 | 1.6 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 16 | 1.6 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE3 | 13 | 1.6 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE3 | 13 | 1.6 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE3 | 13 | 1.6 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 6 | 1.6 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 6 | 1.6 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 6 | 1.6 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG11 | 6 | 1.6 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG12 | 6 | 1.6 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG13 | 6 | 1.6 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 13 | 1.6 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 15 | 1.6 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 1.6 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 1.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 1.6 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 20 | 1.6 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 20 | 1.6 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 20 | 1.6 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG21 | 8 | 1.6 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG22 | 8 | 1.6 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG23 | 8 | 1.6 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG21 | 8 | 1.6 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG22 | 8 | 1.6 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG23 | 8 | 1.6 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG21 | 8 | 1.6 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG22 | 8 | 1.6 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG23 | 8 | 1.6 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG21 | 11 | 1.6 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG22 | 11 | 1.6 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG23 | 11 | 1.6 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG21 | 11 | 1.6 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG22 | 11 | 1.6 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG23 | 11 | 1.6 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG21 | 11 | 1.6 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG22 | 11 | 1.6 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG23 | 11 | 1.6 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 1.6 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 1.6 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 1.6 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 17 | 1.6 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 17 | 1.6 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 17 | 1.6 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG11 | 7 | 1.6 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG12 | 7 | 1.6 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG13 | 7 | 1.6 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG11 | 7 | 1.6 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG12 | 7 | 1.6 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG13 | 7 | 1.6 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 7 | 1.6 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 7 | 1.6 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG13 | 7 | 1.6 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB3 | 6 | 1.6 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB3 | 6 | 1.6 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB3 | 6 | 1.6 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:155:LYS:H | 9 | 1.6 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:155:LYS:H | 9 | 1.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:155:LYS:H | 9 | 1.6 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 4 | 1.6 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 4 | 1.6 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 4 | 1.6 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 4 | 1.6 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 4 | 1.6 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 4 | 1.6 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 4 | 1.6 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 4 | 1.6 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 4 | 1.6 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB2 | 15 | 1.6 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB2 | 15 | 1.6 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB2 | 15 | 1.6 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 8 | 1.6 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 8 | 1.6 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 8 | 1.6 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 14 | 1.6 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 14 | 1.6 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 14 | 1.6 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 9 | 1.59 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 9 | 1.59 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 9 | 1.59 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 5 | 1.59 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 5 | 1.59 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 5 | 1.59 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 5 | 1.59 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 5 | 1.59 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 5 | 1.59 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 1.59 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 1.59 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 1.59 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 1.59 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 1.59 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 1.59 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 1.59 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 1.59 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 1.59 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 1.59 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 1.59 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 1.59 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 15 | 1.59 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:HB | 2 | 1.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:HB | 2 | 1.59 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:HB | 2 | 1.59 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 8 | 1.59 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 8 | 1.59 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 8 | 1.59 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 14 | 1.59 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 14 | 1.59 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 14 | 1.59 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 14 | 1.59 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 14 | 1.59 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 14 | 1.59 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG11 | 14 | 1.59 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG12 | 14 | 1.59 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG13 | 14 | 1.59 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:H | 5 | 1.59 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 5 | 1.59 |
| (1,335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:H | 5 | 1.59 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 1.59 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 1.59 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 1.59 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 16 | 1.59 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 16 | 1.59 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 16 | 1.59 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 19 | 1.59 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 19 | 1.59 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 19 | 1.59 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 9 | 1.59 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 9 | 1.59 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 9 | 1.59 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:134:GLN:HE22 | 13 | 1.59 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:134:GLN:HE22 | 13 | 1.59 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:134:GLN:HE22 | 13 | 1.59 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 7 | 1.59 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 7 | 1.59 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 7 | 1.59 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 15 | 1.59 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 15 | 1.59 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 15 | 1.59 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 10 | 1.59 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 10 | 1.59 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 10 | 1.59 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:H | 7 | 1.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:H | 7 | 1.59 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:H | 7 | 1.59 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:H | 12 | 1.59 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:H | 12 | 1.59 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:H | 12 | 1.59 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE1 | 14 | 1.58 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE2 | 14 | 1.58 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE1 | 14 | 1.58 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE2 | 14 | 1.58 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE1 | 14 | 1.58 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE2 | 14 | 1.58 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 9 | 1.58 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 9 | 1.58 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 9 | 1.58 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 9 | 1.58 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 9 | 1.58 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 9 | 1.58 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 11 | 1.58 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 11 | 1.58 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 11 | 1.58 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 11 | 1.58 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 11 | 1.58 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 11 | 1.58 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 14 | 1.58 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 14 | 1.58 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 14 | 1.58 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 14 | 1.58 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 14 | 1.58 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 14 | 1.58 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 3 | 1.58 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 3 | 1.58 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 3 | 1.58 |
| (1,2867) | 1:A:149:ASN:HB3 | 1:A:178:LYS:HE3 | 18 | 1.58 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG21 | 10 | 1.58 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG22 | 10 | 1.58 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG23 | 10 | 1.58 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 19 | 1.58 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 19 | 1.58 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 19 | 1.58 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 3 | 1.58 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 3 | 1.58 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 3 | 1.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 18 | 1.58 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 18 | 1.58 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 18 | 1.58 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 19 | 1.58 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 19 | 1.58 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 19 | 1.58 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 19 | 1.58 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 19 | 1.58 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 19 | 1.58 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 19 | 1.58 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 19 | 1.58 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 19 | 1.58 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 9 | 1.58 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 9 | 1.58 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 9 | 1.58 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 10 | 1.58 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 10 | 1.58 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 10 | 1.58 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:HA | 19 | 1.58 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:HA | 19 | 1.58 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:HA | 19 | 1.58 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:H | 15 | 1.58 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:111:LEU:H | 15 | 1.58 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:111:LEU:H | 15 | 1.58 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB2 | 3 | 1.58 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB2 | 3 | 1.58 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB2 | 3 | 1.58 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 14 | 1.58 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 14 | 1.58 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 14 | 1.58 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 5 | 1.57 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 5 | 1.57 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 5 | 1.57 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 6 | 1.57 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 6 | 1.57 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 6 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 3 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 3 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 3 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 3 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 3 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 3 | 1.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 13 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 13 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 13 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 13 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 13 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 13 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 16 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 16 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 16 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 16 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 16 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 16 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 17 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 17 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 17 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 17 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 17 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 17 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 19 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 19 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 19 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 19 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 19 | 1.57 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 19 | 1.57 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 19 | 1.57 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 19 | 1.57 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 19 | 1.57 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 7 | 1.57 |
| (1,2867) | 1:A:149:ASN:HB3 | 1:A:178:LYS:HE3 | 11 | 1.57 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 5 | 1.57 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 5 | 1.57 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 5 | 1.57 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG21 | 18 | 1.57 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG22 | 18 | 1.57 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG23 | 18 | 1.57 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG21 | 17 | 1.57 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG22 | 17 | 1.57 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG23 | 17 | 1.57 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG21 | 17 | 1.57 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG22 | 17 | 1.57 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG23 | 17 | 1.57 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG21 | 17 | 1.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG22 | 17 | 1.57 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG23 | 17 | 1.57 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 6 | 1.57 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 6 | 1.57 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 6 | 1.57 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 14 | 1.57 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 14 | 1.57 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 14 | 1.57 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 1.57 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 1.57 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 1.57 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:134:GLN:HE22 | 6 | 1.57 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:134:GLN:HE22 | 6 | 1.57 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:134:GLN:HE22 | 6 | 1.57 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG21 | 8 | 1.57 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG22 | 8 | 1.57 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG23 | 8 | 1.57 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG21 | 8 | 1.57 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG22 | 8 | 1.57 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG23 | 8 | 1.57 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG21 | 8 | 1.57 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG22 | 8 | 1.57 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG23 | 8 | 1.57 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB3 | 13 | 1.57 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB3 | 13 | 1.57 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB3 | 13 | 1.57 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 9 | 1.57 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 9 | 1.57 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 9 | 1.57 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 12 | 1.57 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 12 | 1.57 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 12 | 1.57 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 19 | 1.57 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 19 | 1.57 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 19 | 1.57 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 12 | 1.57 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 12 | 1.57 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 12 | 1.57 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 2 | 1.57 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 2 | 1.57 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 2 | 1.57 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 11 | 1.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 11 | 1.57 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 11 | 1.57 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE1 | 15 | 1.56 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE2 | 15 | 1.56 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE1 | 15 | 1.56 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE2 | 15 | 1.56 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE1 | 15 | 1.56 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE2 | 15 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 6 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 6 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 6 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 6 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 6 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 6 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 8 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 8 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 8 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 8 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 8 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 8 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 12 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 12 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 12 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 12 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 12 | 1.56 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 12 | 1.56 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE1 | 9 | 1.56 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE2 | 9 | 1.56 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE1 | 9 | 1.56 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE2 | 9 | 1.56 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE1 | 9 | 1.56 |
| (1,3984) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE2 | 9 | 1.56 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HA | 9 | 1.56 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HA | 9 | 1.56 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HA | 9 | 1.56 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HA | 15 | 1.56 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HA | 15 | 1.56 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HA | 15 | 1.56 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 6 | 1.56 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 6 | 1.56 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 6 | 1.56 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG21 | 18 | 1.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG22 | 18 | 1.56 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG23 | 18 | 1.56 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG21 | 18 | 1.56 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG22 | 18 | 1.56 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG23 | 18 | 1.56 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG21 | 18 | 1.56 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG22 | 18 | 1.56 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG23 | 18 | 1.56 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 1.56 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 1.56 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 1.56 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 16 | 1.56 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 16 | 1.56 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 16 | 1.56 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:134:GLN:HE22 | 1 | 1.56 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:134:GLN:HE22 | 1 | 1.56 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:134:GLN:HE22 | 1 | 1.56 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HA | 7 | 1.56 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HA | 7 | 1.56 |
| (1,1929) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HA | 7 | 1.56 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 2 | 1.56 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 2 | 1.56 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 2 | 1.56 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 9 | 1.56 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 9 | 1.56 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 9 | 1.56 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 1.56 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 1.56 |
| (1,1686) | 1:A:144:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 1.56 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 1.56 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 1.56 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 1.56 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 2 | 1.56 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 2 | 1.56 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 2 | 1.56 |
| (1,732) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:130:THR:H | 13 | 1.55 |
| (1,732) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:130:THR:H | 13 | 1.55 |
| (1,732) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:130:THR:H | 13 | 1.55 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 6 | 1.55 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 6 | 1.55 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 6 | 1.55 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 19 | 1.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 19 | 1.55 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 19 | 1.55 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 1.55 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 1.55 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 1.55 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 1.55 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 1.55 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 1.55 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD1 | 10 | 1.55 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD2 | 10 | 1.55 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD1 | 10 | 1.55 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD2 | 10 | 1.55 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD1 | 10 | 1.55 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD2 | 10 | 1.55 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 10 | 1.55 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 10 | 1.55 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 10 | 1.55 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 10 | 1.55 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 10 | 1.55 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 10 | 1.55 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 18 | 1.55 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 18 | 1.55 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 18 | 1.55 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 18 | 1.55 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 18 | 1.55 |
| (1,3834) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 18 | 1.55 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 10 | 1.55 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 10 | 1.55 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 10 | 1.55 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 10 | 1.55 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 1.55 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 1.55 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 1.55 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 12 | 1.55 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 12 | 1.55 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 12 | 1.55 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 10 | 1.55 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 10 | 1.55 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 10 | 1.55 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 2 | 1.55 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 2 | 1.55 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 2 | 1.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 7 | 1.55 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 7 | 1.55 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 7 | 1.55 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:134:GLN:HE22 | 10 | 1.55 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:134:GLN:HE22 | 10 | 1.55 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:134:GLN:HE22 | 10 | 1.55 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 1.55 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 1.55 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 1.55 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 1.55 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 1.55 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 1.55 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 1.55 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 1.55 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 1.55 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 19 | 1.55 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 19 | 1.55 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 19 | 1.55 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB3 | 6 | 1.55 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB3 | 6 | 1.55 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB3 | 6 | 1.55 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:155:LYS:H | 4 | 1.55 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:155:LYS:H | 4 | 1.55 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:155:LYS:H | 4 | 1.55 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:155:LYS:H | 17 | 1.55 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:155:LYS:H | 17 | 1.55 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:155:LYS:H | 17 | 1.55 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:H | 8 | 1.55 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 8 | 1.55 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:H | 8 | 1.55 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 19 | 1.55 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 19 | 1.55 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 19 | 1.55 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 2 | 1.54 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 2 | 1.54 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 2 | 1.54 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 10 | 1.54 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 10 | 1.54 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 10 | 1.54 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 2 | 1.54 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 2 | 1.54 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 2 | 1.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 2 | 1.54 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 2 | 1.54 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 2 | 1.54 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 7 | 1.54 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 7 | 1.54 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 7 | 1.54 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 7 | 1.54 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 7 | 1.54 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 7 | 1.54 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD1 | 5 | 1.54 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD2 | 5 | 1.54 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD1 | 5 | 1.54 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD2 | 5 | 1.54 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD1 | 5 | 1.54 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD2 | 5 | 1.54 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 1 | 1.54 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:HB | 8 | 1.54 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:HB | 8 | 1.54 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:HB | 8 | 1.54 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 17 | 1.54 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 17 | 1.54 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 17 | 1.54 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG21 | 9 | 1.54 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG22 | 9 | 1.54 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG23 | 9 | 1.54 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 12 | 1.54 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 12 | 1.54 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 12 | 1.54 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 1.54 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 1.54 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 1.54 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 1.54 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 1.54 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 1.54 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 1.54 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 1.54 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 1.54 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 8 | 1.54 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 8 | 1.54 |
| (1,2413) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 8 | 1.54 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 16 | 1.54 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 16 | 1.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 16 | 1.54 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 5 | 1.54 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 5 | 1.54 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 5 | 1.54 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 3 | 1.54 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 3 | 1.54 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 3 | 1.54 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 10 | 1.54 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 10 | 1.54 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 10 | 1.54 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 1.54 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 1.54 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 1.54 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 1.54 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 1.54 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 1.54 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 1.54 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 1.54 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 1.54 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 17 | 1.54 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 17 | 1.54 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 17 | 1.54 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 17 | 1.54 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 17 | 1.54 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 17 | 1.54 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 17 | 1.54 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 17 | 1.54 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 17 | 1.54 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 1.54 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 1.54 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 1.54 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 1.54 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 1.54 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 1.54 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 1.54 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 1.54 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 1.54 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 1.54 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 1.54 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 1.54 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:H | 18 | 1.54 |
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:H | 18 | 1.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1471) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:H | 18 | 1.54 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB1 | 6 | 1.54 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB2 | 6 | 1.54 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB3 | 6 | 1.54 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB1 | 6 | 1.54 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB2 | 6 | 1.54 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB3 | 6 | 1.54 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB1 | 6 | 1.54 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB2 | 6 | 1.54 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB3 | 6 | 1.54 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 6 | 1.54 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 6 | 1.54 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 6 | 1.54 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 12 | 1.54 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 12 | 1.54 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 12 | 1.54 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 3 | 1.54 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 3 | 1.54 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 3 | 1.54 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 16 | 1.54 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 16 | 1.54 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 16 | 1.54 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:54:PHE:H | 13 | 1.53 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:54:PHE:H | 13 | 1.53 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:54:PHE:H | 13 | 1.53 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 1 | 1.53 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 1 | 1.53 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 1 | 1.53 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 1 | 1.53 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 1 | 1.53 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 1 | 1.53 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 10 | 1.53 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 10 | 1.53 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 10 | 1.53 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 10 | 1.53 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 10 | 1.53 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 10 | 1.53 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 13 | 1.53 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 13 | 1.53 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 13 | 1.53 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 13 | 1.53 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 13 | 1.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 13 | 1.53 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 13 | 1.53 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 13 | 1.53 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 13 | 1.53 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 13 | 1.53 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 13 | 1.53 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 13 | 1.53 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 18 | 1.53 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 7 | 1.53 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 7 | 1.53 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 7 | 1.53 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 20 | 1.53 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 20 | 1.53 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 20 | 1.53 |
| (1,2867) | 1:A:149:ASN:HB3 | 1:A:178:LYS:HE3 | 3 | 1.53 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 19 | 1.53 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 19 | 1.53 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 19 | 1.53 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 12 | 1.53 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 12 | 1.53 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 12 | 1.53 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 14 | 1.53 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 14 | 1.53 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 14 | 1.53 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 16 | 1.53 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 16 | 1.53 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 16 | 1.53 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 9 | 1.53 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 9 | 1.53 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 9 | 1.53 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:H | 10 | 1.53 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:H | 10 | 1.53 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:H | 10 | 1.53 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 16 | 1.53 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 16 | 1.53 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 16 | 1.53 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG21 | 19 | 1.53 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG22 | 19 | 1.53 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG23 | 19 | 1.53 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG21 | 19 | 1.53 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG22 | 19 | 1.53 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG23 | 19 | 1.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG21 | 19 | 1.53 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG22 | 19 | 1.53 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG23 | 19 | 1.53 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 20 | 1.53 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 20 | 1.53 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 20 | 1.53 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 19 | 1.52 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 19 | 1.52 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 19 | 1.52 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 18 | 1.52 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 18 | 1.52 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 18 | 1.52 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 19 | 1.52 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 19 | 1.52 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 19 | 1.52 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE1 | 8 | 1.52 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE2 | 8 | 1.52 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE1 | 8 | 1.52 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE2 | 8 | 1.52 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE1 | 8 | 1.52 |
| (1,3996) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE2 | 8 | 1.52 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 1.52 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 1.52 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 1.52 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 1.52 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 1.52 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 1.52 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 8 | 1.52 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 13 | 1.52 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 17 | 1.52 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 17 | 1.52 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 17 | 1.52 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 17 | 1.52 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 17 | 1.52 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 17 | 1.52 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 17 | 1.52 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 1.52 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 1.52 |
| (1,3400) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 1.52 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 16 | 1.52 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 1.52 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 1.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 1.52 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 1.52 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 1.52 |
| (1,2417) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 1.52 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 11 | 1.52 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 11 | 1.52 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 11 | 1.52 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 13 | 1.52 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 13 | 1.52 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 13 | 1.52 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 16 | 1.52 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 16 | 1.52 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 16 | 1.52 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 3 | 1.52 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 3 | 1.52 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 3 | 1.52 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 1.52 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 1.52 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 1.52 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 20 | 1.52 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 20 | 1.52 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 20 | 1.52 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB3 | 10 | 1.52 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB3 | 10 | 1.52 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB3 | 10 | 1.52 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 19 | 1.52 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 19 | 1.52 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 19 | 1.52 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 1.52 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 1.52 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 1.52 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 1 | 1.52 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 1 | 1.52 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 1 | 1.52 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:H | 10 | 1.52 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:H | 10 | 1.52 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:H | 10 | 1.52 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 11 | 1.52 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 11 | 1.52 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 11 | 1.52 |
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 18 | 1.51 |
| (1,708) | 1:A:66:ALA:H | 1:A:124:LEU:HD11 | 10 | 1.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,708) | 1:A:66:ALA:H | 1:A:124:LEU:HD12 | 10 | 1.51 |
| (1,708) | 1:A:66:ALA:H | 1:A:124:LEU:HD13 | 10 | 1.51 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 1.51 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 1.51 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 1.51 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 1.51 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 1.51 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 1.51 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 11 | 1.51 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 11 | 1.51 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 11 | 1.51 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 15 | 1.51 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 15 | 1.51 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 15 | 1.51 |
| (1,3433) | 1:A:67:SER:HB3 | 1:A:123:THR:HA | 2 | 1.51 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HB | 14 | 1.51 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HB | 14 | 1.51 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HB | 14 | 1.51 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE2 | 14 | 1.51 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE2 | 14 | 1.51 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE2 | 14 | 1.51 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB3 | 7 | 1.51 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB3 | 7 | 1.51 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB3 | 7 | 1.51 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 1.51 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 1.51 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 1.51 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 16 | 1.51 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 16 | 1.51 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 16 | 1.51 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 6 | 1.51 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 6 | 1.51 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 6 | 1.51 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 9 | 1.51 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 9 | 1.51 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 9 | 1.51 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 6 | 1.51 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 6 | 1.51 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 6 | 1.51 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 1 | 1.51 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 1 | 1.51 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 1 | 1.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 15 | 1.51 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 15 | 1.51 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 15 | 1.51 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:H | 10 | 1.51 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:H | 10 | 1.51 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:H | 10 | 1.51 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:134:GLN:HE22 | 15 | 1.51 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:134:GLN:HE22 | 15 | 1.51 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:134:GLN:HE22 | 15 | 1.51 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG11 | 13 | 1.51 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG12 | 13 | 1.51 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG13 | 13 | 1.51 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG11 | 13 | 1.51 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG12 | 13 | 1.51 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG13 | 13 | 1.51 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG11 | 13 | 1.51 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG12 | 13 | 1.51 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG13 | 13 | 1.51 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 9 | 1.51 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 9 | 1.51 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 9 | 1.51 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 9 | 1.51 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 9 | 1.51 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 9 | 1.51 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 9 | 1.51 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 9 | 1.51 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 9 | 1.51 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB3 | 5 | 1.51 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB3 | 5 | 1.51 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB3 | 5 | 1.51 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG21 | 14 | 1.51 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG22 | 14 | 1.51 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG23 | 14 | 1.51 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:H | 3 | 1.51 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 3 | 1.51 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:H | 3 | 1.51 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG2 | 10 | 1.51 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG3 | 10 | 1.51 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG2 | 10 | 1.51 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG3 | 10 | 1.51 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 10 | 1.51 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 10 | 1.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 16 | 1.51 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 16 | 1.51 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 16 | 1.51 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 15 | 1.5 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 15 | 1.5 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 15 | 1.5 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 15 | 1.5 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 15 | 1.5 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 15 | 1.5 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 17 | 1.5 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD1 | 15 | 1.5 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HD2 | 15 | 1.5 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD1 | 15 | 1.5 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HD2 | 15 | 1.5 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD1 | 15 | 1.5 |
| (1,3849) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HD2 | 15 | 1.5 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:111:LEU:HD11 | 10 | 1.5 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:111:LEU:HD12 | 10 | 1.5 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:111:LEU:HD13 | 10 | 1.5 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:111:LEU:HD11 | 10 | 1.5 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:111:LEU:HD12 | 10 | 1.5 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:111:LEU:HD13 | 10 | 1.5 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 2 | 1.5 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 2 | 1.5 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 2 | 1.5 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 2 | 1.5 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 2 | 1.5 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 2 | 1.5 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 4 | 1.5 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 4 | 1.5 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 4 | 1.5 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 4 | 1.5 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 4 | 1.5 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 4 | 1.5 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 2 | 1.5 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 2 | 1.5 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 2 | 1.5 |
| (1,2867) | 1:A:149:ASN:HB3 | 1:A:178:LYS:HE3 | 4 | 1.5 |
| (1,2867) | 1:A:149:ASN:HB3 | 1:A:178:LYS:HE3 | 17 | 1.5 |
| (1,2745) | 1:A:104:LEU:HB2 | 1:A:108:GLY:HA3 | 7 | 1.5 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HA | 5 | 1.5 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HA | 5 | 1.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HA | 5 | 1.5 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG21 | 15 | 1.5 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG22 | 15 | 1.5 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG23 | 15 | 1.5 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG21 | 15 | 1.5 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG22 | 15 | 1.5 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG23 | 15 | 1.5 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG21 | 15 | 1.5 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG22 | 15 | 1.5 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG23 | 15 | 1.5 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 8 | 1.5 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 8 | 1.5 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 8 | 1.5 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 10 | 1.5 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 10 | 1.5 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 10 | 1.5 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 8 | 1.5 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 8 | 1.5 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 8 | 1.5 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 8 | 1.5 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 8 | 1.5 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 8 | 1.5 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 1.5 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 1.5 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 1.5 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 1.5 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 1.5 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 1.5 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 1.5 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 1.5 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 1.5 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 19 | 1.5 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 19 | 1.5 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 19 | 1.5 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 19 | 1.5 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 19 | 1.5 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 19 | 1.5 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 10 | 1.5 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 10 | 1.5 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 10 | 1.5 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:H | 18 | 1.5 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:H | 18 | 1.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:H | 18 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 1.5 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 1.5 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:H | 14 | 1.5 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:H | 14 | 1.5 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:H | 14 | 1.5 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 14 | 1.5 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 14 | 1.5 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 14 | 1.5 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:54:PHE:H | 9 | 1.49 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:54:PHE:H | 9 | 1.49 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:54:PHE:H | 9 | 1.49 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:101:VAL:H | 4 | 1.49 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:101:VAL:H | 4 | 1.49 |
| (1,580) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:101:VAL:H | 4 | 1.49 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:111:LEU:HD11 | 19 | 1.49 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:111:LEU:HD12 | 19 | 1.49 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:111:LEU:HD13 | 19 | 1.49 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:111:LEU:HD11 | 19 | 1.49 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:111:LEU:HD12 | 19 | 1.49 |
| (1,3848) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:111:LEU:HD13 | 19 | 1.49 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 2 | 1.49 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 3 | 1.49 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 16 | 1.49 |
| (1,3536) | 1:A:122:THR:HA | 1:A:124:LEU:HD21 | 10 | 1.49 |
| (1,3536) | 1:A:122:THR:HA | 1:A:124:LEU:HD22 | 10 | 1.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3536) | 1:A:122:THR:HA | 1:A:124:LEU:HD23 | 10 | 1.49 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE2 | 13 | 1.49 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE2 | 13 | 1.49 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE2 | 13 | 1.49 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 14 | 1.49 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 14 | 1.49 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 14 | 1.49 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 1.49 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 1.49 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 1.49 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG11 | 16 | 1.49 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG12 | 16 | 1.49 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG13 | 16 | 1.49 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG11 | 16 | 1.49 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG12 | 16 | 1.49 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG13 | 16 | 1.49 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 16 | 1.49 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 16 | 1.49 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG13 | 16 | 1.49 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:H | 11 | 1.49 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:H | 11 | 1.49 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:H | 11 | 1.49 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG11 | 13 | 1.49 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG12 | 13 | 1.49 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG13 | 13 | 1.49 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 2 | 1.49 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 2 | 1.49 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 2 | 1.49 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 2 | 1.49 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 2 | 1.49 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 2 | 1.49 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 2 | 1.49 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 2 | 1.49 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 2 | 1.49 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB3 | 7 | 1.49 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB3 | 7 | 1.49 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB3 | 7 | 1.49 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 11 | 1.49 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 11 | 1.49 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 11 | 1.49 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:HA | 13 | 1.49 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:HA | 13 | 1.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:HA | 13 | 1.49 |
| (1,135) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:H | 13 | 1.49 |
| (1,135) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:H | 13 | 1.49 |
| (1,135) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:H | 13 | 1.49 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 1.48 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 1.48 |
| (1,451) | 1:A:40:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 1.48 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 12 | 1.48 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 12 | 1.48 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 12 | 1.48 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 12 | 1.48 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 12 | 1.48 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 12 | 1.48 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 6 | 1.48 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 1 | 1.48 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 1 | 1.48 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 1 | 1.48 |
| (1,2867) | 1:A:149:ASN:HB3 | 1:A:178:LYS:HE3 | 1 | 1.48 |
| (1,2867) | 1:A:149:ASN:HB3 | 1:A:178:LYS:HE3 | 12 | 1.48 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 13 | 1.48 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 13 | 1.48 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 13 | 1.48 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 17 | 1.48 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 17 | 1.48 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 17 | 1.48 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:134:GLN:HE22 | 7 | 1.48 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:134:GLN:HE22 | 7 | 1.48 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:134:GLN:HE22 | 7 | 1.48 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HA | 19 | 1.48 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HA | 19 | 1.48 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HA | 19 | 1.48 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 6 | 1.48 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 6 | 1.48 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 6 | 1.48 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 6 | 1.48 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 6 | 1.48 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 6 | 1.48 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 6 | 1.48 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 6 | 1.48 |
| (1,1797) | 1:A:76:THR:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 6 | 1.48 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 14 | 1.48 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 14 | 1.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 14 | 1.48 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 3 | 1.48 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 3 | 1.48 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 3 | 1.48 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 15 | 1.48 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 15 | 1.48 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 15 | 1.48 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:H | 10 | 1.48 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 10 | 1.48 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:H | 10 | 1.48 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:H | 18 | 1.48 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 18 | 1.48 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:H | 18 | 1.48 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:H | 5 | 1.48 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:111:LEU:H | 5 | 1.48 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:111:LEU:H | 5 | 1.48 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:H | 13 | 1.48 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:111:LEU:H | 13 | 1.48 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:111:LEU:H | 13 | 1.48 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 1 | 1.48 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 1 | 1.48 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 1 | 1.48 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 5 | 1.48 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 5 | 1.48 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 5 | 1.48 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 5 | 1.48 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 5 | 1.48 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 5 | 1.48 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:57:GLN:H | 5 | 1.47 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:57:GLN:H | 5 | 1.47 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:57:GLN:H | 5 | 1.47 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD1 | 4 | 1.47 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD2 | 4 | 1.47 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD1 | 4 | 1.47 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD2 | 4 | 1.47 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD1 | 4 | 1.47 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD2 | 4 | 1.47 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 17 | 1.47 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 17 | 1.47 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 17 | 1.47 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 6 | 1.47 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 6 | 1.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 6 | 1.47 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 6 | 1.47 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 6 | 1.47 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 6 | 1.47 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 9 | 1.47 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 4 | 1.47 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 4 | 1.47 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 4 | 1.47 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG11 | 4 | 1.47 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG12 | 4 | 1.47 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG13 | 4 | 1.47 |
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 5 | 1.47 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB3 | 3 | 1.47 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB3 | 3 | 1.47 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB3 | 3 | 1.47 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB3 | 15 | 1.47 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB3 | 15 | 1.47 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB3 | 15 | 1.47 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 1.47 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 1.47 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 1.47 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HA | 7 | 1.47 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HA | 7 | 1.47 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HA | 7 | 1.47 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 2 | 1.47 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 2 | 1.47 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 2 | 1.47 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 15 | 1.47 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 15 | 1.47 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 15 | 1.47 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:134:GLN:HE22 | 5 | 1.47 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:134:GLN:HE22 | 5 | 1.47 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:134:GLN:HE22 | 5 | 1.47 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 12 | 1.47 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 12 | 1.47 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 12 | 1.47 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 1 | 1.47 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 1 | 1.47 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 1 | 1.47 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 1 | 1.47 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 1 | 1.47 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 1 | 1.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 1 | 1.47 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 1 | 1.47 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 1 | 1.47 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 15 | 1.47 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 15 | 1.47 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 15 | 1.47 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG21 | 7 | 1.47 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG22 | 7 | 1.47 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG23 | 7 | 1.47 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 3 | 1.47 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 3 | 1.47 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 3 | 1.47 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 16 | 1.47 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 16 | 1.47 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 16 | 1.47 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 2 | 1.46 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 2 | 1.46 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 2 | 1.46 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 18 | 1.46 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 18 | 1.46 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 18 | 1.46 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD1 | 4 | 1.46 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD2 | 4 | 1.46 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD1 | 4 | 1.46 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD2 | 4 | 1.46 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD1 | 4 | 1.46 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD2 | 4 | 1.46 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 13 | 1.46 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 14 | 1.46 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 16 | 1.46 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 16 | 1.46 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 16 | 1.46 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 7 | 1.46 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 7 | 1.46 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 7 | 1.46 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG11 | 7 | 1.46 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG12 | 7 | 1.46 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG13 | 7 | 1.46 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 9 | 1.46 |
| (1,2867) | 1:A:149:ASN:HB3 | 1:A:178:LYS:HE3 | 10 | 1.46 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB3 | 8 | 1.46 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB3 | 8 | 1.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB3 | 8 | 1.46 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 18 | 1.46 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 18 | 1.46 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 18 | 1.46 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG21 | 9 | 1.46 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG22 | 9 | 1.46 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG23 | 9 | 1.46 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG21 | 9 | 1.46 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG22 | 9 | 1.46 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG23 | 9 | 1.46 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG21 | 9 | 1.46 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG22 | 9 | 1.46 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG23 | 9 | 1.46 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 4 | 1.46 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 4 | 1.46 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 4 | 1.46 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 7 | 1.46 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 7 | 1.46 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 7 | 1.46 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 13 | 1.46 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 13 | 1.46 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 13 | 1.46 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 1.46 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 1.46 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 1.46 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 1 | 1.46 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 1 | 1.46 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 1 | 1.46 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG11 | 15 | 1.46 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG12 | 15 | 1.46 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG13 | 15 | 1.46 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG11 | 15 | 1.46 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG12 | 15 | 1.46 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG13 | 15 | 1.46 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG11 | 15 | 1.46 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG12 | 15 | 1.46 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG13 | 15 | 1.46 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HA | 14 | 1.46 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HA | 14 | 1.46 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HA | 14 | 1.46 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 11 | 1.46 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 11 | 1.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 11 | 1.46 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:H | 16 | 1.46 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:H | 16 | 1.46 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:H | 16 | 1.46 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:H | 5 | 1.46 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:H | 5 | 1.46 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:H | 5 | 1.46 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 1 | 1.46 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 1 | 1.46 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 1 | 1.46 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:H | 5 | 1.46 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:H | 5 | 1.46 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:H | 5 | 1.46 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 14 | 1.46 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 14 | 1.46 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 14 | 1.46 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:179:GLY:H | 4 | 1.46 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:179:GLY:H | 4 | 1.46 |
| (1,1117) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:179:GLY:H | 4 | 1.46 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD1 | 11 | 1.45 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD2 | 11 | 1.45 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD1 | 11 | 1.45 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD2 | 11 | 1.45 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD1 | 11 | 1.45 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD2 | 11 | 1.45 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 3 | 1.45 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 3 | 1.45 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 3 | 1.45 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 3 | 1.45 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 3 | 1.45 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 3 | 1.45 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 13 | 1.45 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 13 | 1.45 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 13 | 1.45 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 13 | 1.45 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 13 | 1.45 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 13 | 1.45 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 5 | 1.45 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 16 | 1.45 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 16 | 1.45 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 16 | 1.45 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG21 | 19 | 1.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG22 | 19 | 1.45 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG23 | 19 | 1.45 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 4 | 1.45 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 4 | 1.45 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 4 | 1.45 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 19 | 1.45 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 19 | 1.45 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 19 | 1.45 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG21 | 13 | 1.45 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG22 | 13 | 1.45 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG23 | 13 | 1.45 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG21 | 13 | 1.45 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG22 | 13 | 1.45 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG23 | 13 | 1.45 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG21 | 13 | 1.45 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG22 | 13 | 1.45 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG23 | 13 | 1.45 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 11 | 1.45 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 11 | 1.45 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 11 | 1.45 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 7 | 1.45 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 7 | 1.45 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 7 | 1.45 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 11 | 1.45 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 11 | 1.45 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 11 | 1.45 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB3 | 14 | 1.45 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB3 | 14 | 1.45 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB3 | 14 | 1.45 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG21 | 11 | 1.45 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG22 | 11 | 1.45 |
| (1,1687) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:181:VAL:HG23 | 11 | 1.45 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 18 | 1.45 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 18 | 1.45 |
| (1,1683) | 1:A:39:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 18 | 1.45 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 7 | 1.45 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 7 | 1.45 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 7 | 1.45 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG2 | 19 | 1.45 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG3 | 19 | 1.45 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG2 | 19 | 1.45 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG3 | 19 | 1.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 19 | 1.45 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 19 | 1.45 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 9 | 1.45 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 9 | 1.45 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 9 | 1.45 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:131:ILE:HG13 | 8 | 1.45 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:131:ILE:HG13 | 8 | 1.45 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:131:ILE:HG13 | 8 | 1.45 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 2 | 1.45 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 2 | 1.45 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 2 | 1.45 |
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 9 | 1.44 |
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 11 | 1.44 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 6 | 1.44 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 6 | 1.44 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 6 | 1.44 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:HB | 12 | 1.44 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:HB | 12 | 1.44 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:HB | 12 | 1.44 |
| (1,331) | 1:A:150:ALA:H | 1:A:178:LYS:HE3 | 18 | 1.44 |
| (1,2864) | 1:A:89:GLN:HE21 | 1:A:178:LYS:HE3 | 11 | 1.44 |
| (1,262) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 1.44 |
| (1,262) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 1.44 |
| (1,262) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 1.44 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 10 | 1.44 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 10 | 1.44 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 10 | 1.44 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 1.44 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 1.44 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 1.44 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 1.44 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 1.44 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 1.44 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 5 | 1.44 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 5 | 1.44 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 5 | 1.44 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 4 | 1.44 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 4 | 1.44 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 4 | 1.44 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 11 | 1.44 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 11 | 1.44 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 11 | 1.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG11 | 9 | 1.44 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG12 | 9 | 1.44 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG13 | 9 | 1.44 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG11 | 18 | 1.44 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG12 | 18 | 1.44 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG13 | 18 | 1.44 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG2 | 16 | 1.44 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG3 | 16 | 1.44 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG2 | 16 | 1.44 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG3 | 16 | 1.44 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 16 | 1.44 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 16 | 1.44 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 1.44 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 1.44 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 1.44 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 10 | 1.44 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 10 | 1.44 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 10 | 1.44 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 6 | 1.44 |
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 2 | 1.43 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 4 | 1.43 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 4 | 1.43 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 4 | 1.43 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 4 | 1.43 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 4 | 1.43 |
| (1,3992) | 1:A:158:TYR:HE2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 4 | 1.43 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 7 | 1.43 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 12 | 1.43 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 12 | 1.43 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 12 | 1.43 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 12 | 1.43 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 12 | 1.43 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 12 | 1.43 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 1 | 1.43 |
| (1,2864) | 1:A:89:GLN:HE21 | 1:A:178:LYS:HE3 | 1 | 1.43 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HA | 3 | 1.43 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HA | 3 | 1.43 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HA | 3 | 1.43 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 3 | 1.43 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 3 | 1.43 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 3 | 1.43 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:H | 4 | 1.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:H | 4 | 1.43 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:H | 4 | 1.43 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 7 | 1.43 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 7 | 1.43 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 7 | 1.43 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG21 | 7 | 1.43 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG22 | 7 | 1.43 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG23 | 7 | 1.43 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG21 | 7 | 1.43 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG22 | 7 | 1.43 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG23 | 7 | 1.43 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG21 | 7 | 1.43 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG22 | 7 | 1.43 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG23 | 7 | 1.43 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 18 | 1.43 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 18 | 1.43 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 18 | 1.43 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 18 | 1.43 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 18 | 1.43 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 18 | 1.43 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 18 | 1.43 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 18 | 1.43 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 18 | 1.43 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG11 | 14 | 1.43 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG12 | 14 | 1.43 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG13 | 14 | 1.43 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG21 | 10 | 1.43 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG22 | 10 | 1.43 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG23 | 10 | 1.43 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG21 | 10 | 1.43 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG22 | 10 | 1.43 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG23 | 10 | 1.43 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG21 | 10 | 1.43 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG22 | 10 | 1.43 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG23 | 10 | 1.43 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 20 | 1.43 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 20 | 1.43 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 20 | 1.43 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 1 | 1.43 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 1 | 1.43 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 1 | 1.43 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:HA | 4 | 1.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:HA | 4 | 1.43 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:HA | 4 | 1.43 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 16 | 1.43 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 16 | 1.43 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 16 | 1.43 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 16 | 1.43 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 16 | 1.43 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 16 | 1.43 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 16 | 1.43 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 16 | 1.43 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 16 | 1.43 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG2 | 20 | 1.43 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG3 | 20 | 1.43 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG2 | 20 | 1.43 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG3 | 20 | 1.43 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 20 | 1.43 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 20 | 1.43 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB1 | 11 | 1.43 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB2 | 11 | 1.43 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB3 | 11 | 1.43 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB1 | 11 | 1.43 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB2 | 11 | 1.43 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB3 | 11 | 1.43 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB1 | 11 | 1.43 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB2 | 11 | 1.43 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB3 | 11 | 1.43 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB2 | 7 | 1.43 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB2 | 7 | 1.43 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB2 | 7 | 1.43 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 7 | 1.43 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 7 | 1.43 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 7 | 1.43 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 16 | 1.42 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 16 | 1.42 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 16 | 1.42 |
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 12 | 1.42 |
| (1,708) | 1:A:66:ALA:H | 1:A:124:LEU:HD11 | 9 | 1.42 |
| (1,708) | 1:A:66:ALA:H | 1:A:124:LEU:HD12 | 9 | 1.42 |
| (1,708) | 1:A:66:ALA:H | 1:A:124:LEU:HD13 | 9 | 1.42 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 20 | 1.42 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 13 | 1.42 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 13 | 1.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 13 | 1.42 |
| (1,3497) | 1:A:106:ARG:HB2 | 1:A:132:PRO:HD2 | 16 | 1.42 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 8 | 1.42 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 8 | 1.42 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 8 | 1.42 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG11 | 8 | 1.42 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG12 | 8 | 1.42 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG13 | 8 | 1.42 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 7 | 1.42 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE2 | 5 | 1.42 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE2 | 5 | 1.42 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE2 | 5 | 1.42 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 8 | 1.42 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 8 | 1.42 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 8 | 1.42 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 15 | 1.42 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 15 | 1.42 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 15 | 1.42 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 10 | 1.42 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 10 | 1.42 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 10 | 1.42 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 12 | 1.42 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 12 | 1.42 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 12 | 1.42 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 15 | 1.42 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 15 | 1.42 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 15 | 1.42 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 15 | 1.42 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 15 | 1.42 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 15 | 1.42 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 15 | 1.42 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 15 | 1.42 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 15 | 1.42 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 17 | 1.42 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 17 | 1.42 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 17 | 1.42 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB3 | 8 | 1.42 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB3 | 8 | 1.42 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB3 | 8 | 1.42 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:H | 4 | 1.42 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:H | 4 | 1.42 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:H | 4 | 1.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 18 | 1.42 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 18 | 1.42 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 18 | 1.42 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB2 | 9 | 1.42 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB3 | 9 | 1.42 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB2 | 9 | 1.42 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB3 | 9 | 1.42 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB2 | 9 | 1.42 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB3 | 9 | 1.42 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 1.42 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 1.42 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 1.42 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 16 | 1.42 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 16 | 1.42 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 16 | 1.42 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB2 | 8 | 1.42 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB2 | 8 | 1.42 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB2 | 8 | 1.42 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 11 | 1.42 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 11 | 1.42 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 11 | 1.42 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 14 | 1.42 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 1 | 1.41 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 6 | 1.41 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 6 | 1.41 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 6 | 1.41 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 6 | 1.41 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 6 | 1.41 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 6 | 1.41 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 16 | 1.41 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 16 | 1.41 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 16 | 1.41 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 16 | 1.41 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 16 | 1.41 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 16 | 1.41 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 18 | 1.41 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 18 | 1.41 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 18 | 1.41 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 18 | 1.41 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 18 | 1.41 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 18 | 1.41 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 5 | 1.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 5 | 1.41 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 5 | 1.41 |
| (1,2867) | 1:A:149:ASN:HB3 | 1:A:178:LYS:HE3 | 7 | 1.41 |
| (1,2867) | 1:A:149:ASN:HB3 | 1:A:178:LYS:HE3 | 15 | 1.41 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG21 | 4 | 1.41 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG22 | 4 | 1.41 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG23 | 4 | 1.41 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG21 | 4 | 1.41 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG22 | 4 | 1.41 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG23 | 4 | 1.41 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG21 | 4 | 1.41 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG22 | 4 | 1.41 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG23 | 4 | 1.41 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 3 | 1.41 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 3 | 1.41 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 3 | 1.41 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 5 | 1.41 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 5 | 1.41 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 5 | 1.41 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 6 | 1.41 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 6 | 1.41 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 6 | 1.41 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG21 | 3 | 1.41 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG22 | 3 | 1.41 |
| (1,2112) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:156:VAL:HG23 | 3 | 1.41 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 2 | 1.41 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 2 | 1.41 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 2 | 1.41 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:H | 8 | 1.41 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:H | 8 | 1.41 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:H | 8 | 1.41 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 11 | 1.41 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 11 | 1.41 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 11 | 1.41 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 14 | 1.41 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 14 | 1.41 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 14 | 1.41 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 18 | 1.41 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 18 | 1.41 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 18 | 1.41 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 13 | 1.41 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 13 | 1.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 13 | 1.41 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:HA | 9 | 1.41 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:HA | 9 | 1.41 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:HA | 9 | 1.41 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:H | 7 | 1.41 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:111:LEU:H | 7 | 1.41 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:111:LEU:H | 7 | 1.41 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:111:LEU:H | 12 | 1.41 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:111:LEU:H | 12 | 1.41 |
| (1,1559) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:111:LEU:H | 12 | 1.41 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE22 | 10 | 1.41 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE22 | 10 | 1.41 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE22 | 10 | 1.41 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 10 | 1.41 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 10 | 1.41 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 10 | 1.41 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 11 | 1.4 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 11 | 1.4 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 11 | 1.4 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 1.4 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 1.4 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 1.4 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 1.4 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 1.4 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 1.4 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 15 | 1.4 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 15 | 1.4 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 15 | 1.4 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 4 | 1.4 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 4 | 1.4 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 4 | 1.4 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 9 | 1.4 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 9 | 1.4 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 9 | 1.4 |
| (1,3273) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:159:GLN:HG2 | 10 | 1.4 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 1.4 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 1.4 |
| (1,27) | 1:A:148:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 1.4 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HA | 4 | 1.4 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HA | 4 | 1.4 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HA | 4 | 1.4 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 1 | 1.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 1 | 1.4 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 1 | 1.4 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 4 | 1.4 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 4 | 1.4 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 4 | 1.4 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 14 | 1.4 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 14 | 1.4 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 14 | 1.4 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 13 | 1.4 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 13 | 1.4 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 13 | 1.4 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 15 | 1.4 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 15 | 1.4 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 15 | 1.4 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:H | 5 | 1.4 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:H | 5 | 1.4 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:H | 5 | 1.4 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 8 | 1.4 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 8 | 1.4 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 8 | 1.4 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 20 | 1.4 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 20 | 1.4 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 20 | 1.4 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 19 | 1.4 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 19 | 1.4 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 19 | 1.4 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB2 | 17 | 1.4 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB3 | 17 | 1.4 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB2 | 17 | 1.4 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB3 | 17 | 1.4 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB2 | 17 | 1.4 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB3 | 17 | 1.4 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 4 | 1.4 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 4 | 1.4 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 4 | 1.4 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 1 | 1.4 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 1 | 1.4 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 1 | 1.4 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB1 | 10 | 1.4 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB2 | 10 | 1.4 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB3 | 10 | 1.4 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB1 | 10 | 1.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB2 | 10 | 1.4 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB3 | 10 | 1.4 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB1 | 10 | 1.4 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB2 | 10 | 1.4 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB3 | 10 | 1.4 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD1 | 9 | 1.39 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD2 | 9 | 1.39 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD1 | 9 | 1.39 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD2 | 9 | 1.39 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD1 | 9 | 1.39 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD2 | 9 | 1.39 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 9 | 1.39 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 9 | 1.39 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 9 | 1.39 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 9 | 1.39 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 9 | 1.39 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 9 | 1.39 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 4 | 1.39 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 4 | 1.39 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 4 | 1.39 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 4 | 1.39 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 4 | 1.39 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 4 | 1.39 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 8 | 1.39 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE3 | 15 | 1.39 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE3 | 15 | 1.39 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE3 | 15 | 1.39 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:HB | 9 | 1.39 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:HB | 9 | 1.39 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:HB | 9 | 1.39 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG11 | 5 | 1.39 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG12 | 5 | 1.39 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG13 | 5 | 1.39 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 6 | 1.39 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 6 | 1.39 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 6 | 1.39 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 13 | 1.39 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 13 | 1.39 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 13 | 1.39 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 19 | 1.39 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 19 | 1.39 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 19 | 1.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 13 | 1.39 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 13 | 1.39 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 13 | 1.39 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG11 | 1 | 1.39 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG12 | 1 | 1.39 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG13 | 1 | 1.39 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG11 | 1 | 1.39 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG12 | 1 | 1.39 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG13 | 1 | 1.39 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 1 | 1.39 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 1 | 1.39 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG13 | 1 | 1.39 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG21 | 6 | 1.39 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG22 | 6 | 1.39 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG23 | 6 | 1.39 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG21 | 6 | 1.39 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG22 | 6 | 1.39 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG23 | 6 | 1.39 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG21 | 6 | 1.39 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG22 | 6 | 1.39 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG23 | 6 | 1.39 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 7 | 1.39 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 7 | 1.39 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 7 | 1.39 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 7 | 1.39 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 7 | 1.39 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 7 | 1.39 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 7 | 1.39 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 7 | 1.39 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 7 | 1.39 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 11 | 1.39 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 11 | 1.39 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 11 | 1.39 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 11 | 1.39 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 11 | 1.39 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 11 | 1.39 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:H | 19 | 1.39 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:H | 19 | 1.39 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:H | 19 | 1.39 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 6 | 1.39 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 6 | 1.39 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 6 | 1.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 20 | 1.39 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 20 | 1.39 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 20 | 1.39 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:155:LYS:H | 10 | 1.39 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:155:LYS:H | 10 | 1.39 |
| (1,1658) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:155:LYS:H | 10 | 1.39 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HA | 4 | 1.39 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HA | 4 | 1.39 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HA | 4 | 1.39 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 2 | 1.39 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 2 | 1.39 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 2 | 1.39 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 2 | 1.39 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 2 | 1.39 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 2 | 1.39 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 2 | 1.39 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 2 | 1.39 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 2 | 1.39 |
| (1,1419) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:106:ARG:HA | 6 | 1.39 |
| (1,1419) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:106:ARG:HA | 11 | 1.39 |
| (1,1419) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:106:ARG:HA | 13 | 1.39 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG2 | 4 | 1.39 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG3 | 4 | 1.39 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG2 | 4 | 1.39 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG3 | 4 | 1.39 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 4 | 1.39 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 4 | 1.39 |
| (1,1312) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:124:LEU:HD11 | 15 | 1.39 |
| (1,1312) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:124:LEU:HD12 | 15 | 1.39 |
| (1,1312) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:124:LEU:HD13 | 15 | 1.39 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HA | 5 | 1.39 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HA | 5 | 1.39 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HA | 5 | 1.39 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 13 | 1.39 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 13 | 1.39 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 13 | 1.39 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 12 | 1.39 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 12 | 1.39 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 12 | 1.39 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HD21 | 6 | 1.38 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HD21 | 6 | 1.38 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HD21 | 6 | 1.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 10 | 1.38 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 10 | 1.38 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 10 | 1.38 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 10 | 1.38 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 5 | 1.38 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 5 | 1.38 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 5 | 1.38 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 5 | 1.38 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 5 | 1.38 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 5 | 1.38 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 15 | 1.38 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 15 | 1.38 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 15 | 1.38 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 15 | 1.38 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 15 | 1.38 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 15 | 1.38 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 2 | 1.38 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 2 | 1.38 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 2 | 1.38 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 2 | 1.38 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 2 | 1.38 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 2 | 1.38 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG21 | 17 | 1.38 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG22 | 17 | 1.38 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG23 | 17 | 1.38 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG21 | 19 | 1.38 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG22 | 19 | 1.38 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG23 | 19 | 1.38 |
| (1,2867) | 1:A:149:ASN:HB3 | 1:A:178:LYS:HE3 | 5 | 1.38 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 11 | 1.38 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 11 | 1.38 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 11 | 1.38 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 12 | 1.38 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 12 | 1.38 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 12 | 1.38 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 18 | 1.38 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 18 | 1.38 |
| (1,2410) | 1:A:39:THR:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 18 | 1.38 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 4 | 1.38 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 4 | 1.38 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 4 | 1.38 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG11 | 4 | 1.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG12 | 4 | 1.38 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG13 | 4 | 1.38 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG11 | 4 | 1.38 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG12 | 4 | 1.38 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG13 | 4 | 1.38 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 4 | 1.38 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 4 | 1.38 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG13 | 4 | 1.38 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 10 | 1.38 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 10 | 1.38 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 10 | 1.38 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 1.38 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 1.38 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 1.38 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 1.38 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 1.38 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 1.38 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB3 | 20 | 1.38 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB3 | 20 | 1.38 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB3 | 20 | 1.38 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 2 | 1.38 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 2 | 1.38 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 2 | 1.38 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 12 | 1.38 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 12 | 1.38 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 12 | 1.38 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 16 | 1.38 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 16 | 1.38 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 16 | 1.38 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG21 | 20 | 1.38 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG22 | 20 | 1.38 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG23 | 20 | 1.38 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG21 | 20 | 1.38 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG22 | 20 | 1.38 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG23 | 20 | 1.38 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG21 | 20 | 1.38 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG22 | 20 | 1.38 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG23 | 20 | 1.38 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HA | 9 | 1.38 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HA | 9 | 1.38 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HA | 9 | 1.38 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HA | 16 | 1.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HA | 16 | 1.38 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HA | 16 | 1.38 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HA | 18 | 1.38 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HA | 18 | 1.38 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HA | 18 | 1.38 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HA | 19 | 1.38 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HA | 19 | 1.38 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HA | 19 | 1.38 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 11 | 1.38 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 11 | 1.38 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 11 | 1.38 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HA | 16 | 1.38 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HA | 16 | 1.38 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HA | 16 | 1.38 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 1 | 1.38 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 1 | 1.38 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 1 | 1.38 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 15 | 1.38 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 15 | 1.38 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 15 | 1.38 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 6 | 1.37 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 6 | 1.37 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 6 | 1.37 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD1 | 19 | 1.37 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD2 | 19 | 1.37 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD1 | 19 | 1.37 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD2 | 19 | 1.37 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD1 | 19 | 1.37 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD2 | 19 | 1.37 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 1 | 1.37 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 1 | 1.37 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 1 | 1.37 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 1 | 1.37 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 1 | 1.37 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 1 | 1.37 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 10 | 1.37 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 10 | 1.37 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 10 | 1.37 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 10 | 1.37 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 10 | 1.37 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 10 | 1.37 |
| (1,3793) | 1:A:99:VAL:HA | 1:A:137:TYR:HB2 | 19 | 1.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 1 | 1.37 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 1 | 1.37 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 1 | 1.37 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG11 | 20 | 1.37 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG12 | 20 | 1.37 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG13 | 20 | 1.37 |
| (1,3518) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:133:PHE:HE1 | 11 | 1.37 |
| (1,3518) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:133:PHE:HE2 | 11 | 1.37 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 9 | 1.37 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 9 | 1.37 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 9 | 1.37 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG21 | 5 | 1.37 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG22 | 5 | 1.37 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG23 | 5 | 1.37 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG21 | 5 | 1.37 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG22 | 5 | 1.37 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG23 | 5 | 1.37 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG21 | 5 | 1.37 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG22 | 5 | 1.37 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG23 | 5 | 1.37 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 8 | 1.37 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 8 | 1.37 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 8 | 1.37 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 2 | 1.37 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 2 | 1.37 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 2 | 1.37 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 18 | 1.37 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 18 | 1.37 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 18 | 1.37 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 14 | 1.37 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 14 | 1.37 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 14 | 1.37 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB3 | 12 | 1.37 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB3 | 12 | 1.37 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB3 | 12 | 1.37 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 6 | 1.37 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 6 | 1.37 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 6 | 1.37 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 8 | 1.37 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 8 | 1.37 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 8 | 1.37 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 13 | 1.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 13 | 1.37 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 13 | 1.37 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 1 | 1.37 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 1 | 1.37 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 1 | 1.37 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HA | 20 | 1.37 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HA | 20 | 1.37 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HA | 20 | 1.37 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:H | 1 | 1.37 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 1 | 1.37 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:H | 1 | 1.37 |
| (1,1419) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:106:ARG:HA | 12 | 1.37 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 4 | 1.36 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 4 | 1.36 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 4 | 1.36 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 20 | 1.36 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 20 | 1.36 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 20 | 1.36 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 20 | 1.36 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 20 | 1.36 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 20 | 1.36 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 5 | 1.36 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 5 | 1.36 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 5 | 1.36 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 18 | 1.36 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 18 | 1.36 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 18 | 1.36 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG21 | 6 | 1.36 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG22 | 6 | 1.36 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG23 | 6 | 1.36 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 2 | 1.36 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 2 | 1.36 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 2 | 1.36 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 18 | 1.36 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 18 | 1.36 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 18 | 1.36 |
| (1,2864) | 1:A:89:GLN:HE21 | 1:A:178:LYS:HE3 | 5 | 1.36 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 17 | 1.36 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 5 | 1.36 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 5 | 1.36 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 5 | 1.36 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 15 | 1.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 15 | 1.36 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 15 | 1.36 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 19 | 1.36 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 19 | 1.36 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 19 | 1.36 |
| (1,1975) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HB2 | 18 | 1.36 |
| (1,1975) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HB2 | 18 | 1.36 |
| (1,1975) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HB2 | 18 | 1.36 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG21 | 8 | 1.36 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG22 | 8 | 1.36 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG23 | 8 | 1.36 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG21 | 19 | 1.36 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG22 | 19 | 1.36 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG23 | 19 | 1.36 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 11 | 1.36 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 11 | 1.36 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 11 | 1.36 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 16 | 1.36 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 16 | 1.36 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 16 | 1.36 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HZ | 15 | 1.36 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HZ | 15 | 1.36 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HZ | 15 | 1.36 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG21 | 16 | 1.36 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG22 | 16 | 1.36 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG23 | 16 | 1.36 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG21 | 16 | 1.36 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG22 | 16 | 1.36 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG23 | 16 | 1.36 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG21 | 16 | 1.36 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG22 | 16 | 1.36 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG23 | 16 | 1.36 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HA | 8 | 1.36 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HA | 8 | 1.36 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HA | 8 | 1.36 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HA | 10 | 1.36 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HA | 10 | 1.36 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HA | 10 | 1.36 |
| (1,1419) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:106:ARG:HA | 5 | 1.36 |
| (1,1419) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:106:ARG:HA | 15 | 1.36 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HA | 8 | 1.36 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HA | 8 | 1.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HA | 8 | 1.36 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB2 | 16 | 1.36 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB2 | 16 | 1.36 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB2 | 16 | 1.36 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 7 | 1.36 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 7 | 1.36 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 7 | 1.36 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 19 | 1.36 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 19 | 1.36 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 19 | 1.36 |
| (1,1156) | 1:A:67:SER:H | 1:A:124:LEU:HD11 | 13 | 1.36 |
| (1,1156) | 1:A:67:SER:H | 1:A:124:LEU:HD12 | 13 | 1.36 |
| (1,1156) | 1:A:67:SER:H | 1:A:124:LEU:HD13 | 13 | 1.36 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 5 | 1.36 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 5 | 1.36 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 5 | 1.36 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 13 | 1.36 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 13 | 1.36 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 13 | 1.36 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 17 | 1.36 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 20 | 1.35 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 20 | 1.35 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 20 | 1.35 |
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 6 | 1.35 |
| (1,2867) | 1:A:149:ASN:HB3 | 1:A:178:LYS:HE3 | 20 | 1.35 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 12 | 1.35 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 12 | 1.35 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 12 | 1.35 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG21 | 7 | 1.35 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG22 | 7 | 1.35 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG23 | 7 | 1.35 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG21 | 7 | 1.35 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG22 | 7 | 1.35 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG23 | 7 | 1.35 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG21 | 7 | 1.35 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG22 | 7 | 1.35 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG23 | 7 | 1.35 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 12 | 1.35 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 12 | 1.35 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 12 | 1.35 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HA | 3 | 1.35 |
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HA | 3 | 1.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2384) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HA | 3 | 1.35 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 17 | 1.35 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 17 | 1.35 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 17 | 1.35 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 1.35 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 1.35 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 1.35 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG11 | 9 | 1.35 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG12 | 9 | 1.35 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG13 | 9 | 1.35 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG11 | 9 | 1.35 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG12 | 9 | 1.35 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG13 | 9 | 1.35 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG11 | 9 | 1.35 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG12 | 9 | 1.35 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG13 | 9 | 1.35 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HA | 13 | 1.35 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HA | 13 | 1.35 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HA | 13 | 1.35 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG21 | 1 | 1.35 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG22 | 1 | 1.35 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG23 | 1 | 1.35 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 2 | 1.35 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 2 | 1.35 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 2 | 1.35 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 7 | 1.35 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 7 | 1.35 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 7 | 1.35 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 15 | 1.35 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 15 | 1.35 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 15 | 1.35 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HA | 2 | 1.35 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HA | 2 | 1.35 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HA | 2 | 1.35 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HA | 7 | 1.35 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HA | 7 | 1.35 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HA | 7 | 1.35 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HA | 13 | 1.35 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HA | 13 | 1.35 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HA | 13 | 1.35 |
| (1,1419) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:106:ARG:HA | 1 | 1.35 |
| (1,1419) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:106:ARG:HA | 8 | 1.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG2 | 2 | 1.35 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG3 | 2 | 1.35 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG2 | 2 | 1.35 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG3 | 2 | 1.35 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 2 | 1.35 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 2 | 1.35 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HA | 3 | 1.35 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HA | 3 | 1.35 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HA | 3 | 1.35 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 17 | 1.35 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 17 | 1.35 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 17 | 1.35 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 6 | 1.34 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 7 | 1.34 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 7 | 1.34 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 7 | 1.34 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 7 | 1.34 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 7 | 1.34 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 7 | 1.34 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:HB | 15 | 1.34 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:HB | 15 | 1.34 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:HB | 15 | 1.34 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:HB | 16 | 1.34 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:HB | 16 | 1.34 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:HB | 16 | 1.34 |
| (1,3536) | 1:A:122:THR:HA | 1:A:124:LEU:HD21 | 15 | 1.34 |
| (1,3536) | 1:A:122:THR:HA | 1:A:124:LEU:HD22 | 15 | 1.34 |
| (1,3536) | 1:A:122:THR:HA | 1:A:124:LEU:HD23 | 15 | 1.34 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG21 | 3 | 1.34 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG22 | 3 | 1.34 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG23 | 3 | 1.34 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 3 | 1.34 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 3 | 1.34 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 3 | 1.34 |
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 7 | 1.34 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 14 | 1.34 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 14 | 1.34 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 14 | 1.34 |
| (1,2373) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HA | 9 | 1.34 |
| (1,2373) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HA | 9 | 1.34 |
| (1,2373) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HA | 9 | 1.34 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 17 | 1.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 17 | 1.34 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 17 | 1.34 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG11 | 13 | 1.34 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG12 | 13 | 1.34 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG13 | 13 | 1.34 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG11 | 13 | 1.34 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG12 | 13 | 1.34 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG13 | 13 | 1.34 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 13 | 1.34 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 13 | 1.34 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG13 | 13 | 1.34 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 4 | 1.34 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 4 | 1.34 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 4 | 1.34 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 3 | 1.34 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 3 | 1.34 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 3 | 1.34 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 3 | 1.34 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 3 | 1.34 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 3 | 1.34 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 3 | 1.34 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 3 | 1.34 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 3 | 1.34 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 18 | 1.34 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 18 | 1.34 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 18 | 1.34 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 13 | 1.34 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 13 | 1.34 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 13 | 1.34 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 12 | 1.34 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 12 | 1.34 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 12 | 1.34 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 1 | 1.34 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 1 | 1.34 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 1 | 1.34 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 10 | 1.34 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 10 | 1.34 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 10 | 1.34 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 6 | 1.34 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 6 | 1.34 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 6 | 1.34 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG11 | 2 | 1.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG12 | 2 | 1.34 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG13 | 2 | 1.34 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HA | 11 | 1.34 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HA | 11 | 1.34 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HA | 11 | 1.34 |
| (1,1419) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:106:ARG:HA | 10 | 1.34 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HA | 15 | 1.34 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HA | 15 | 1.34 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HA | 15 | 1.34 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE22 | 8 | 1.34 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE22 | 8 | 1.34 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE22 | 8 | 1.34 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 3 | 1.34 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 3 | 1.34 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 3 | 1.34 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 20 | 1.34 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 20 | 1.34 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 20 | 1.34 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 1 | 1.34 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 1 | 1.34 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 1 | 1.34 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 9 | 1.34 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 9 | 1.34 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 9 | 1.34 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 3 | 1.34 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 7 | 1.34 |
| (1,957) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:171:ASN:HD21 | 19 | 1.33 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 1 | 1.33 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 1 | 1.33 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 1 | 1.33 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 18 | 1.33 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 18 | 1.33 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 18 | 1.33 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 15 | 1.33 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 15 | 1.33 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 15 | 1.33 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 7 | 1.33 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 7 | 1.33 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 7 | 1.33 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 7 | 1.33 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 7 | 1.33 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 7 | 1.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 6 | 1.33 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 6 | 1.33 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 6 | 1.33 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 11 | 1.33 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 14 | 1.33 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 14 | 1.33 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 14 | 1.33 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 14 | 1.33 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 1.33 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 1.33 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 1.33 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 2 | 1.33 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 2 | 1.33 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 2 | 1.33 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 4 | 1.33 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 4 | 1.33 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 4 | 1.33 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 9 | 1.33 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 9 | 1.33 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 9 | 1.33 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 9 | 1.33 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 9 | 1.33 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 9 | 1.33 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 9 | 1.33 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 9 | 1.33 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 9 | 1.33 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG21 | 19 | 1.33 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG22 | 19 | 1.33 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG23 | 19 | 1.33 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG21 | 19 | 1.33 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG22 | 19 | 1.33 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG23 | 19 | 1.33 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG21 | 19 | 1.33 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG22 | 19 | 1.33 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG23 | 19 | 1.33 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 3 | 1.33 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 3 | 1.33 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 3 | 1.33 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 8 | 1.33 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 8 | 1.33 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 8 | 1.33 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 15 | 1.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 15 | 1.33 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 15 | 1.33 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 20 | 1.33 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 20 | 1.33 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 20 | 1.33 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 5 | 1.33 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 5 | 1.33 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 5 | 1.33 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG11 | 13 | 1.33 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG12 | 13 | 1.33 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG13 | 13 | 1.33 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG11 | 17 | 1.33 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG12 | 17 | 1.33 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG13 | 17 | 1.33 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 14 | 1.33 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 14 | 1.33 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 14 | 1.33 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HA | 14 | 1.33 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HA | 14 | 1.33 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HA | 14 | 1.33 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 1.33 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 1.33 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 1.33 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 1.33 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 1.33 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 1.33 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 1.33 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 1.33 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 1.33 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 7 | 1.33 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 7 | 1.33 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 7 | 1.33 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 16 | 1.33 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 16 | 1.33 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 16 | 1.33 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG11 | 5 | 1.32 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG12 | 5 | 1.32 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG13 | 5 | 1.32 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 1 | 1.32 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 1 | 1.32 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 1 | 1.32 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 7 | 1.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 7 | 1.32 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 7 | 1.32 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 12 | 1.32 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 12 | 1.32 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 12 | 1.32 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 1 | 1.32 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 1 | 1.32 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 1 | 1.32 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 1 | 1.32 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 1 | 1.32 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 1 | 1.32 |
| (1,3242) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HB | 3 | 1.32 |
| (1,2867) | 1:A:149:ASN:HB3 | 1:A:178:LYS:HE3 | 2 | 1.32 |
| (1,2745) | 1:A:104:LEU:HB2 | 1:A:108:GLY:HA3 | 16 | 1.32 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 13 | 1.32 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 13 | 1.32 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 13 | 1.32 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG21 | 19 | 1.32 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG22 | 19 | 1.32 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG23 | 19 | 1.32 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG21 | 19 | 1.32 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG22 | 19 | 1.32 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG23 | 19 | 1.32 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG21 | 19 | 1.32 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG22 | 19 | 1.32 |
| (1,2496) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG23 | 19 | 1.32 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG11 | 10 | 1.32 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG12 | 10 | 1.32 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG13 | 10 | 1.32 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG11 | 10 | 1.32 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG12 | 10 | 1.32 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG13 | 10 | 1.32 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 10 | 1.32 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 10 | 1.32 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG13 | 10 | 1.32 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 1.32 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 1.32 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 1.32 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 1.32 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 1.32 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 1.32 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 1.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 1.32 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 1.32 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 1.32 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 1.32 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 1.32 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 1.32 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 1.32 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 1.32 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 12 | 1.32 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 12 | 1.32 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 12 | 1.32 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 7 | 1.32 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 7 | 1.32 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 7 | 1.32 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 8 | 1.32 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 8 | 1.32 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 8 | 1.32 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB2 | 2 | 1.32 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB3 | 2 | 1.32 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB2 | 2 | 1.32 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB3 | 2 | 1.32 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB2 | 2 | 1.32 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB3 | 2 | 1.32 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB2 | 8 | 1.32 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB3 | 8 | 1.32 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB2 | 8 | 1.32 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB3 | 8 | 1.32 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB2 | 8 | 1.32 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB3 | 8 | 1.32 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HA | 3 | 1.32 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HA | 3 | 1.32 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HA | 3 | 1.32 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 5 | 1.32 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 5 | 1.32 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 5 | 1.32 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 13 | 1.32 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 13 | 1.32 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 13 | 1.32 |
| (1,1419) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:106:ARG:HA | 9 | 1.32 |
| (1,1419) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:106:ARG:HA | 14 | 1.32 |
| (1,1323) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:118:PHE:HA | 19 | 1.32 |
| (1,1323) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:118:PHE:HA | 19 | 1.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1323) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:118:PHE:HA | 19 | 1.32 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HA | 15 | 1.32 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HA | 15 | 1.32 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HA | 15 | 1.32 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 15 | 1.31 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 19 | 1.31 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG21 | 10 | 1.31 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG22 | 10 | 1.31 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG23 | 10 | 1.31 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 14 | 1.31 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 14 | 1.31 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 14 | 1.31 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:H | 10 | 1.31 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:H | 10 | 1.31 |
| (1,281) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:H | 10 | 1.31 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 1 | 1.31 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 1 | 1.31 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 1 | 1.31 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 6 | 1.31 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 6 | 1.31 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 6 | 1.31 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 1 | 1.31 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 1 | 1.31 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 1 | 1.31 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 19 | 1.31 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 19 | 1.31 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 19 | 1.31 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 17 | 1.31 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 17 | 1.31 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 17 | 1.31 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 12 | 1.31 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 12 | 1.31 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 12 | 1.31 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 19 | 1.31 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 19 | 1.31 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 19 | 1.31 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 11 | 1.31 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 11 | 1.31 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 11 | 1.31 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 11 | 1.31 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 11 | 1.31 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 11 | 1.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 11 | 1.31 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 11 | 1.31 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 11 | 1.31 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 1 | 1.31 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 1 | 1.31 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 1 | 1.31 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 11 | 1.31 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 11 | 1.31 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 11 | 1.31 |
| (1,1975) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HB2 | 10 | 1.31 |
| (1,1975) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HB2 | 10 | 1.31 |
| (1,1975) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HB2 | 10 | 1.31 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 6 | 1.31 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 6 | 1.31 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 6 | 1.31 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 17 | 1.31 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 17 | 1.31 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 17 | 1.31 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 9 | 1.31 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 9 | 1.31 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 9 | 1.31 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 5 | 1.31 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 5 | 1.31 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 5 | 1.31 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 16 | 1.31 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 16 | 1.31 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 16 | 1.31 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 20 | 1.31 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 20 | 1.31 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 20 | 1.31 |
| (1,1419) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:106:ARG:HA | 19 | 1.31 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE22 | 15 | 1.31 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE22 | 15 | 1.31 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE22 | 15 | 1.31 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 15 | 1.31 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 15 | 1.31 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 15 | 1.31 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 8 | 1.31 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 8 | 1.31 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 8 | 1.31 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 8 | 1.31 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 8 | 1.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 8 | 1.31 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 11 | 1.31 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 11 | 1.31 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 11 | 1.31 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 17 | 1.31 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 17 | 1.31 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 17 | 1.31 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 10 | 1.31 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 16 | 1.31 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 13 | 1.3 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 13 | 1.3 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 13 | 1.3 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 9 | 1.3 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 9 | 1.3 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 9 | 1.3 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 17 | 1.3 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 17 | 1.3 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 17 | 1.3 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 17 | 1.3 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 17 | 1.3 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 17 | 1.3 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 10 | 1.3 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 10 | 1.3 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 10 | 1.3 |
| (1,3505) | 1:A:106:ARG:HB2 | 1:A:132:PRO:HG2 | 16 | 1.3 |
| (1,3505) | 1:A:106:ARG:HB2 | 1:A:132:PRO:HG3 | 16 | 1.3 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 7 | 1.3 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 7 | 1.3 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 7 | 1.3 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE2 | 16 | 1.3 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE2 | 16 | 1.3 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE2 | 16 | 1.3 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 17 | 1.3 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 17 | 1.3 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 17 | 1.3 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 1 | 1.3 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 1 | 1.3 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 1 | 1.3 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 19 | 1.3 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 19 | 1.3 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 19 | 1.3 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 2 | 1.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 2 | 1.3 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 2 | 1.3 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 2 | 1.3 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 2 | 1.3 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 2 | 1.3 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:H | 2 | 1.3 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:H | 2 | 1.3 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:H | 2 | 1.3 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG11 | 4 | 1.3 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG12 | 4 | 1.3 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG13 | 4 | 1.3 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG11 | 4 | 1.3 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG12 | 4 | 1.3 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG13 | 4 | 1.3 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG11 | 4 | 1.3 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG12 | 4 | 1.3 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG13 | 4 | 1.3 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG21 | 14 | 1.3 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG22 | 14 | 1.3 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG23 | 14 | 1.3 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG21 | 14 | 1.3 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG22 | 14 | 1.3 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG23 | 14 | 1.3 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG21 | 14 | 1.3 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG22 | 14 | 1.3 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG23 | 14 | 1.3 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 3 | 1.3 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 3 | 1.3 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 3 | 1.3 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 4 | 1.3 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 4 | 1.3 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 4 | 1.3 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 4 | 1.3 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 4 | 1.3 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 4 | 1.3 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 12 | 1.3 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 12 | 1.3 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 12 | 1.3 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB2 | 4 | 1.3 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB3 | 4 | 1.3 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB2 | 4 | 1.3 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB3 | 4 | 1.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB2 | 4 | 1.3 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB3 | 4 | 1.3 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG11 | 10 | 1.3 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG12 | 10 | 1.3 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG13 | 10 | 1.3 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 5 | 1.3 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 5 | 1.3 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 5 | 1.3 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 6 | 1.3 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 6 | 1.3 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 6 | 1.3 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 8 | 1.3 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 8 | 1.3 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 8 | 1.3 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 8 | 1.3 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 8 | 1.3 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 8 | 1.3 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 8 | 1.3 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 8 | 1.3 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 8 | 1.3 |
| (1,1419) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:106:ARG:HA | 7 | 1.3 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HA | 13 | 1.3 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HA | 13 | 1.3 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HA | 13 | 1.3 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:H | 8 | 1.3 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:H | 8 | 1.3 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:H | 8 | 1.3 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 6 | 1.3 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 6 | 1.3 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 6 | 1.3 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 6 | 1.3 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 6 | 1.3 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 6 | 1.3 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 4 | 1.29 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 4 | 1.29 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 4 | 1.29 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 4 | 1.29 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 4 | 1.29 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 4 | 1.29 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 10 | 1.29 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 10 | 1.29 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 10 | 1.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG11 | 10 | 1.29 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG12 | 10 | 1.29 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG13 | 10 | 1.29 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 20 | 1.29 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 20 | 1.29 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 20 | 1.29 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG11 | 20 | 1.29 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG12 | 20 | 1.29 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG13 | 20 | 1.29 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 4 | 1.29 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 4 | 1.29 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 4 | 1.29 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 3 | 1.29 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 3 | 1.29 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 3 | 1.29 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 16 | 1.29 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 16 | 1.29 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 16 | 1.29 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 4 | 1.29 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 4 | 1.29 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 4 | 1.29 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 4 | 1.29 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 4 | 1.29 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 4 | 1.29 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 4 | 1.29 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 4 | 1.29 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 4 | 1.29 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG11 | 7 | 1.29 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG12 | 7 | 1.29 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG13 | 7 | 1.29 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG11 | 17 | 1.29 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG12 | 17 | 1.29 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG13 | 17 | 1.29 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG11 | 19 | 1.29 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG12 | 19 | 1.29 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG13 | 19 | 1.29 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 1 | 1.29 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 1 | 1.29 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 1 | 1.29 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 20 | 1.29 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 20 | 1.29 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 20 | 1.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 8 | 1.29 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 8 | 1.29 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 8 | 1.29 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:H | 15 | 1.29 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:H | 15 | 1.29 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:H | 15 | 1.29 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:H | 17 | 1.29 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:H | 17 | 1.29 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:H | 17 | 1.29 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 8 | 1.29 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 8 | 1.29 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 8 | 1.29 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 14 | 1.29 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 14 | 1.29 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 14 | 1.29 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 1 | 1.29 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 1 | 1.29 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 1 | 1.29 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 2 | 1.29 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 2 | 1.29 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 2 | 1.29 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 9 | 1.29 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 9 | 1.29 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 9 | 1.29 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 15 | 1.29 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 15 | 1.29 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 15 | 1.29 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 17 | 1.29 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 17 | 1.29 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 17 | 1.29 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 20 | 1.29 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 20 | 1.29 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 20 | 1.29 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 11 | 1.29 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 11 | 1.29 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 11 | 1.29 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:HA | 20 | 1.29 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:HA | 20 | 1.29 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:HA | 20 | 1.29 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 1.29 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 1.29 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 1.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1419) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:106:ARG:HA | 20 | 1.29 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG2 | 9 | 1.29 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG3 | 9 | 1.29 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG2 | 9 | 1.29 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG3 | 9 | 1.29 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 9 | 1.29 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 9 | 1.29 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE22 | 16 | 1.29 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE22 | 16 | 1.29 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE22 | 16 | 1.29 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 2 | 1.29 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 2 | 1.29 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 2 | 1.29 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 14 | 1.29 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 14 | 1.29 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 14 | 1.29 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 8 | 1.29 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 15 | 1.28 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 15 | 1.28 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 15 | 1.28 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 19 | 1.28 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 19 | 1.28 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 19 | 1.28 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 7 | 1.28 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 7 | 1.28 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 7 | 1.28 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 16 | 1.28 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 20 | 1.28 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 20 | 1.28 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 20 | 1.28 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 20 | 1.28 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 20 | 1.28 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 20 | 1.28 |
| (1,3242) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HB | 17 | 1.28 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 12 | 1.28 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 12 | 1.28 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 12 | 1.28 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 1 | 1.28 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 5 | 1.28 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 5 | 1.28 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 5 | 1.28 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 10 | 1.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 10 | 1.28 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 10 | 1.28 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 7 | 1.28 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 7 | 1.28 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 7 | 1.28 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 7 | 1.28 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 16 | 1.28 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 16 | 1.28 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 16 | 1.28 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 18 | 1.28 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 18 | 1.28 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 18 | 1.28 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 12 | 1.28 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 12 | 1.28 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 12 | 1.28 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 6 | 1.28 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 6 | 1.28 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 6 | 1.28 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 13 | 1.28 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 13 | 1.28 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 13 | 1.28 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 19 | 1.28 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 19 | 1.28 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 19 | 1.28 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 15 | 1.28 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 15 | 1.28 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 15 | 1.28 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 15 | 1.28 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 6 | 1.28 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 6 | 1.28 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 6 | 1.28 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 12 | 1.28 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 12 | 1.28 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 12 | 1.28 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 13 | 1.28 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 13 | 1.28 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 13 | 1.28 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 13 | 1.28 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 13 | 1.28 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 13 | 1.28 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB3 | 3 | 1.28 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB3 | 3 | 1.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB3 | 3 | 1.28 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 6 | 1.28 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 6 | 1.28 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 6 | 1.28 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 13 | 1.28 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 13 | 1.28 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 13 | 1.28 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 1 | 1.28 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 1 | 1.28 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 1 | 1.28 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 1 | 1.28 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 1 | 1.28 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 1 | 1.28 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 1 | 1.28 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 1 | 1.28 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 1 | 1.28 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 8 | 1.28 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 8 | 1.28 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 8 | 1.28 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 5 | 1.27 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 5 | 1.27 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 5 | 1.27 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 12 | 1.27 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 12 | 1.27 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 12 | 1.27 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 18 | 1.27 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 10 | 1.27 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 10 | 1.27 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 10 | 1.27 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 14 | 1.27 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HB | 6 | 1.27 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HB | 6 | 1.27 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HB | 6 | 1.27 |
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 14 | 1.27 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 15 | 1.27 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 15 | 1.27 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 15 | 1.27 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 16 | 1.27 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 16 | 1.27 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 16 | 1.27 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 2 | 1.27 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 2 | 1.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 2 | 1.27 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HA | 2 | 1.27 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HA | 2 | 1.27 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HA | 2 | 1.27 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 1.27 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 1.27 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 1.27 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 1.27 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 1.27 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 1.27 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 1.27 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 1.27 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 1.27 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 1.27 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 1.27 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 1.27 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 1.27 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 1.27 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 1.27 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 1.27 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 1.27 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 1.27 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 11 | 1.27 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 11 | 1.27 |
| (1,2411) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 11 | 1.27 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 8 | 1.27 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 8 | 1.27 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 8 | 1.27 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 15 | 1.27 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 15 | 1.27 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 15 | 1.27 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 17 | 1.27 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 17 | 1.27 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 17 | 1.27 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG21 | 11 | 1.27 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG22 | 11 | 1.27 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG23 | 11 | 1.27 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG21 | 11 | 1.27 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG22 | 11 | 1.27 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG23 | 11 | 1.27 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG21 | 11 | 1.27 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG22 | 11 | 1.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG23 | 11 | 1.27 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 9 | 1.27 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 9 | 1.27 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 9 | 1.27 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 8 | 1.27 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 8 | 1.27 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 8 | 1.27 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 4 | 1.27 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 4 | 1.27 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 4 | 1.27 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HA | 1 | 1.27 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HA | 1 | 1.27 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HA | 1 | 1.27 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HA | 2 | 1.27 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HA | 2 | 1.27 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HA | 2 | 1.27 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 7 | 1.27 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 7 | 1.27 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 7 | 1.27 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 7 | 1.27 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 7 | 1.27 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 7 | 1.27 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 4 | 1.27 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 4 | 1.27 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 4 | 1.27 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 10 | 1.27 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 10 | 1.27 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 10 | 1.27 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 1 | 1.27 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 1 | 1.27 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 1 | 1.27 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 20 | 1.27 |
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 13 | 1.26 |
| (1,732) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:130:THR:H | 15 | 1.26 |
| (1,732) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:130:THR:H | 15 | 1.26 |
| (1,732) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:130:THR:H | 15 | 1.26 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD1 | 8 | 1.26 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD2 | 8 | 1.26 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD1 | 8 | 1.26 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD2 | 8 | 1.26 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD1 | 8 | 1.26 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD2 | 8 | 1.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 1 | 1.26 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 1 | 1.26 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 1 | 1.26 |
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 2 | 1.26 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE2 | 15 | 1.26 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE2 | 15 | 1.26 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE2 | 15 | 1.26 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 1 | 1.26 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 1 | 1.26 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 1 | 1.26 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 20 | 1.26 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 20 | 1.26 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 20 | 1.26 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG21 | 11 | 1.26 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG22 | 11 | 1.26 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG23 | 11 | 1.26 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 17 | 1.26 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 17 | 1.26 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 17 | 1.26 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 10 | 1.26 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 10 | 1.26 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 10 | 1.26 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 8 | 1.26 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 8 | 1.26 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 8 | 1.26 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 8 | 1.26 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 8 | 1.26 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 8 | 1.26 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 8 | 1.26 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 8 | 1.26 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 8 | 1.26 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG21 | 19 | 1.26 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG22 | 19 | 1.26 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG23 | 19 | 1.26 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 12 | 1.26 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 12 | 1.26 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 12 | 1.26 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 1 | 1.26 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 1 | 1.26 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 1 | 1.26 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 7 | 1.26 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 7 | 1.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 7 | 1.26 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG21 | 18 | 1.26 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG22 | 18 | 1.26 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG23 | 18 | 1.26 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 6 | 1.26 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 6 | 1.26 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 6 | 1.26 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 7 | 1.26 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 7 | 1.26 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 7 | 1.26 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 8 | 1.26 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 8 | 1.26 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 8 | 1.26 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 13 | 1.26 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 13 | 1.26 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 13 | 1.26 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 5 | 1.26 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 5 | 1.26 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 5 | 1.26 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 14 | 1.26 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 14 | 1.26 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 14 | 1.26 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 18 | 1.26 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 18 | 1.26 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 18 | 1.26 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:150:ALA:H | 5 | 1.26 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:150:ALA:H | 5 | 1.26 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:150:ALA:H | 5 | 1.26 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:150:ALA:H | 7 | 1.26 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:150:ALA:H | 7 | 1.26 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:150:ALA:H | 7 | 1.26 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:150:ALA:H | 17 | 1.26 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:150:ALA:H | 17 | 1.26 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:150:ALA:H | 17 | 1.26 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:150:ALA:H | 18 | 1.26 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:150:ALA:H | 18 | 1.26 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:150:ALA:H | 18 | 1.26 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HA | 5 | 1.26 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HA | 5 | 1.26 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HA | 5 | 1.26 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 1.26 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 1.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 1.26 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 1.26 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 1.26 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 1.26 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 1.26 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 1.26 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 1.26 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HA | 4 | 1.26 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HA | 4 | 1.26 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HA | 4 | 1.26 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HA | 9 | 1.26 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HA | 9 | 1.26 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HA | 9 | 1.26 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE22 | 4 | 1.26 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE22 | 4 | 1.26 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE22 | 4 | 1.26 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB1 | 4 | 1.26 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB2 | 4 | 1.26 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB3 | 4 | 1.26 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB1 | 4 | 1.26 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB2 | 4 | 1.26 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB3 | 4 | 1.26 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB1 | 4 | 1.26 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB2 | 4 | 1.26 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB3 | 4 | 1.26 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 12 | 1.26 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 12 | 1.26 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 12 | 1.26 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 10 | 1.25 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 10 | 1.25 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 10 | 1.25 |
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 14 | 1.25 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 10 | 1.25 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 10 | 1.25 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 10 | 1.25 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 20 | 1.25 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 20 | 1.25 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 20 | 1.25 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 17 | 1.25 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 17 | 1.25 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 17 | 1.25 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 13 | 1.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 13 | 1.25 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 13 | 1.25 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG11 | 13 | 1.25 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG12 | 13 | 1.25 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG13 | 13 | 1.25 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 16 | 1.25 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 16 | 1.25 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 16 | 1.25 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG11 | 16 | 1.25 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG12 | 16 | 1.25 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG13 | 16 | 1.25 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 8 | 1.25 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 8 | 1.25 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 8 | 1.25 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 16 | 1.25 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 16 | 1.25 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 16 | 1.25 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 1 | 1.25 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 2 | 1.25 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 2 | 1.25 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 2 | 1.25 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 17 | 1.25 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 17 | 1.25 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 17 | 1.25 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 3 | 1.25 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 3 | 1.25 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 3 | 1.25 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 18 | 1.25 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 18 | 1.25 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 18 | 1.25 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG11 | 15 | 1.25 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG12 | 15 | 1.25 |
| (1,2333) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:170:VAL:HG13 | 15 | 1.25 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 4 | 1.25 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 4 | 1.25 |
| (1,2332) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 4 | 1.25 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 14 | 1.25 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 14 | 1.25 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 14 | 1.25 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 7 | 1.25 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 7 | 1.25 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 7 | 1.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 16 | 1.25 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 16 | 1.25 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 16 | 1.25 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 18 | 1.25 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 18 | 1.25 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 18 | 1.25 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG11 | 7 | 1.25 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG12 | 7 | 1.25 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG13 | 7 | 1.25 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:150:ALA:H | 9 | 1.25 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:150:ALA:H | 9 | 1.25 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:150:ALA:H | 9 | 1.25 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 12 | 1.25 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 12 | 1.25 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 12 | 1.25 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 4 | 1.25 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 4 | 1.25 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 4 | 1.25 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 3 | 1.25 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 3 | 1.25 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 3 | 1.25 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 11 | 1.25 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 19 | 1.25 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 3 | 1.24 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 3 | 1.24 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 3 | 1.24 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 18 | 1.24 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 18 | 1.24 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 18 | 1.24 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 5 | 1.24 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 5 | 1.24 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 5 | 1.24 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:57:GLN:H | 8 | 1.24 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:57:GLN:H | 8 | 1.24 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:57:GLN:H | 8 | 1.24 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 17 | 1.24 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 11 | 1.24 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 11 | 1.24 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 11 | 1.24 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 15 | 1.24 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 15 | 1.24 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 15 | 1.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 15 | 1.24 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 15 | 1.24 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 15 | 1.24 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG21 | 3 | 1.24 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG22 | 3 | 1.24 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG23 | 3 | 1.24 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 20 | 1.24 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 20 | 1.24 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 20 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 7 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 7 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 7 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 7 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 7 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 7 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 10 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 10 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 10 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 10 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 10 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 10 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 12 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 12 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 12 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 12 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 12 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 12 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 14 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 14 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 14 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 14 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 14 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 14 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 18 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 18 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 18 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 18 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 18 | 1.24 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 18 | 1.24 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 11 | 1.24 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 11 | 1.24 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 11 | 1.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 11 | 1.24 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 11 | 1.24 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 11 | 1.24 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:H | 8 | 1.24 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:H | 8 | 1.24 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:H | 8 | 1.24 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 20 | 1.24 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 20 | 1.24 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 20 | 1.24 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 1.24 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 1.24 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 1.24 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HA | 7 | 1.24 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HA | 7 | 1.24 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HA | 7 | 1.24 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG11 | 15 | 1.24 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG12 | 15 | 1.24 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG13 | 15 | 1.24 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG21 | 15 | 1.24 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG22 | 15 | 1.24 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG23 | 15 | 1.24 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 7 | 1.24 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 7 | 1.24 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 7 | 1.24 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 17 | 1.24 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 17 | 1.24 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 17 | 1.24 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG21 | 17 | 1.24 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG22 | 17 | 1.24 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG23 | 17 | 1.24 |
| (1,1827) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:29:ASP:HB3 | 10 | 1.24 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 6 | 1.24 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 6 | 1.24 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 6 | 1.24 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 15 | 1.24 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 15 | 1.24 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 15 | 1.24 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:H | 2 | 1.24 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:H | 2 | 1.24 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:H | 2 | 1.24 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:H | 9 | 1.24 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:H | 9 | 1.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:H | 9 | 1.24 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 11 | 1.24 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 11 | 1.24 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 11 | 1.24 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:150:ALA:H | 2 | 1.24 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:150:ALA:H | 2 | 1.24 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:150:ALA:H | 2 | 1.24 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:150:ALA:H | 8 | 1.24 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:150:ALA:H | 8 | 1.24 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:150:ALA:H | 8 | 1.24 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:150:ALA:H | 11 | 1.24 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:150:ALA:H | 11 | 1.24 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:150:ALA:H | 11 | 1.24 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:150:ALA:H | 15 | 1.24 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:150:ALA:H | 15 | 1.24 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:150:ALA:H | 15 | 1.24 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HA | 19 | 1.24 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HA | 19 | 1.24 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HA | 19 | 1.24 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 19 | 1.24 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 19 | 1.24 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 19 | 1.24 |
| (1,135) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:H | 9 | 1.24 |
| (1,135) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:H | 9 | 1.24 |
| (1,135) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:H | 9 | 1.24 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 12 | 1.24 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 12 | 1.24 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 12 | 1.24 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 14 | 1.24 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 14 | 1.24 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 14 | 1.24 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 5 | 1.24 |
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 3 | 1.23 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 8 | 1.23 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 14 | 1.23 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 14 | 1.23 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 14 | 1.23 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 1 | 1.23 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 1 | 1.23 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 1 | 1.23 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 3 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 1 | 1.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 1 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 1 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 1 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 1 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 1 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 3 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 3 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 3 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 3 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 3 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 3 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 6 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 6 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 6 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 6 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 6 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 6 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 10 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 10 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 10 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 10 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 10 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 10 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 20 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 20 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 20 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 20 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 20 | 1.23 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 20 | 1.23 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 20 | 1.23 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 20 | 1.23 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 20 | 1.23 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 20 | 1.23 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 20 | 1.23 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 20 | 1.23 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG21 | 10 | 1.23 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG22 | 10 | 1.23 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG23 | 10 | 1.23 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 1 | 1.23 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 1 | 1.23 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 1 | 1.23 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 1 | 1.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 1 | 1.23 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 1 | 1.23 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 16 | 1.23 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 16 | 1.23 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 16 | 1.23 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 16 | 1.23 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 16 | 1.23 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 16 | 1.23 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 1.23 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 1.23 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 1.23 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 1.23 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 1.23 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 1.23 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 8 | 1.23 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 8 | 1.23 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 8 | 1.23 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 13 | 1.23 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 13 | 1.23 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 13 | 1.23 |
| (1,2706) | 1:A:66:ALA:HA | 1:A:160:GLY:HA2 | 1 | 1.23 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 15 | 1.23 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 15 | 1.23 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 15 | 1.23 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 9 | 1.23 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 9 | 1.23 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 9 | 1.23 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 5 | 1.23 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 5 | 1.23 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 5 | 1.23 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 1.23 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 1.23 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 1.23 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB3 | 18 | 1.23 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB3 | 18 | 1.23 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB3 | 18 | 1.23 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 10 | 1.23 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 10 | 1.23 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 10 | 1.23 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG21 | 15 | 1.23 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG22 | 15 | 1.23 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG23 | 15 | 1.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 17 | 1.23 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 17 | 1.23 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 17 | 1.23 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 1.23 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 1.23 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 1.23 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 13 | 1.23 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 13 | 1.23 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 13 | 1.23 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 16 | 1.23 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 16 | 1.23 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 16 | 1.23 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 15 | 1.23 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 15 | 1.23 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 15 | 1.23 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 2 | 1.23 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 2 | 1.23 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 2 | 1.23 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 7 | 1.23 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 7 | 1.23 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 7 | 1.23 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG11 | 5 | 1.23 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG12 | 5 | 1.23 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG13 | 5 | 1.23 |
| (1,1609) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:124:LEU:HD11 | 15 | 1.23 |
| (1,1609) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:124:LEU:HD12 | 15 | 1.23 |
| (1,1609) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:124:LEU:HD13 | 15 | 1.23 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HA | 15 | 1.23 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HA | 15 | 1.23 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HA | 15 | 1.23 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 1.23 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 1.23 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 1.23 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 1.23 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 1.23 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 1.23 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG2 | 3 | 1.23 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG3 | 3 | 1.23 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG2 | 3 | 1.23 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG3 | 3 | 1.23 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 3 | 1.23 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 3 | 1.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 2 | 1.23 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 2 | 1.23 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 2 | 1.23 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 2 | 1.23 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 2 | 1.23 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 2 | 1.23 |
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 19 | 1.22 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 2 | 1.22 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 2 | 1.22 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 2 | 1.22 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 16 | 1.22 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 16 | 1.22 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 16 | 1.22 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:54:PHE:H | 19 | 1.22 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:54:PHE:H | 19 | 1.22 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:54:PHE:H | 19 | 1.22 |
| (1,607) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:159:GLN:H | 9 | 1.22 |
| (1,607) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:159:GLN:H | 9 | 1.22 |
| (1,607) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:159:GLN:H | 9 | 1.22 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 14 | 1.22 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 14 | 1.22 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 14 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 2 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 2 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 2 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 2 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 2 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 2 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 4 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 4 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 4 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 4 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 4 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 4 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 5 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 5 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 5 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 5 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 5 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 5 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 7 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 7 | 1.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 7 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 7 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 7 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 7 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 8 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 8 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 8 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 8 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 8 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 8 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 14 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 14 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 14 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 14 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 14 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 14 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 16 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 16 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 16 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 16 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 16 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 16 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 17 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 17 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 17 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 17 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 17 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 17 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 19 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 19 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 19 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 19 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 19 | 1.22 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 19 | 1.22 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 14 | 1.22 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 14 | 1.22 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 14 | 1.22 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 14 | 1.22 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 14 | 1.22 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 14 | 1.22 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 4 | 1.22 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 4 | 1.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 4 | 1.22 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 8 | 1.22 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 8 | 1.22 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 8 | 1.22 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 6 | 1.22 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 6 | 1.22 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 6 | 1.22 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 8 | 1.22 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 8 | 1.22 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 8 | 1.22 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 9 | 1.22 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 9 | 1.22 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 9 | 1.22 |
| (1,2864) | 1:A:89:GLN:HE21 | 1:A:178:LYS:HE3 | 10 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 3 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 3 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 3 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 3 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 3 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 3 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 4 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 4 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 4 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 4 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 4 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 4 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 6 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 6 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 6 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 6 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 6 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 6 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 8 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 8 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 8 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 8 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 8 | 1.22 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 8 | 1.22 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 6 | 1.22 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 6 | 1.22 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 6 | 1.22 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 9 | 1.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 9 | 1.22 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 9 | 1.22 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:134:GLN:HE22 | 4 | 1.22 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:134:GLN:HE22 | 4 | 1.22 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:134:GLN:HE22 | 4 | 1.22 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG21 | 1:A:124:LEU:HD21 | 15 | 1.22 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG21 | 1:A:124:LEU:HD22 | 15 | 1.22 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG21 | 1:A:124:LEU:HD23 | 15 | 1.22 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG22 | 1:A:124:LEU:HD21 | 15 | 1.22 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG22 | 1:A:124:LEU:HD22 | 15 | 1.22 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG22 | 1:A:124:LEU:HD23 | 15 | 1.22 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG23 | 1:A:124:LEU:HD21 | 15 | 1.22 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG23 | 1:A:124:LEU:HD22 | 15 | 1.22 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG23 | 1:A:124:LEU:HD23 | 15 | 1.22 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 12 | 1.22 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 12 | 1.22 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 12 | 1.22 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 12 | 1.22 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 12 | 1.22 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 12 | 1.22 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 12 | 1.22 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 12 | 1.22 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 12 | 1.22 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 13 | 1.22 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 13 | 1.22 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 13 | 1.22 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 14 | 1.22 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 14 | 1.22 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 14 | 1.22 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 5 | 1.22 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 5 | 1.22 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 5 | 1.22 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 15 | 1.22 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 15 | 1.22 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 15 | 1.22 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 12 | 1.22 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 12 | 1.22 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 12 | 1.22 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 19 | 1.22 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 19 | 1.22 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 19 | 1.22 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 11 | 1.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 11 | 1.22 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 11 | 1.22 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 1 | 1.22 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 1 | 1.22 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 1 | 1.22 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB2 | 11 | 1.22 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB3 | 11 | 1.22 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB2 | 11 | 1.22 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB3 | 11 | 1.22 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB2 | 11 | 1.22 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB3 | 11 | 1.22 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG11 | 3 | 1.22 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG12 | 3 | 1.22 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG13 | 3 | 1.22 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG11 | 15 | 1.22 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG12 | 15 | 1.22 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG13 | 15 | 1.22 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:149:ASN:HA | 9 | 1.22 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:149:ASN:HA | 9 | 1.22 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:149:ASN:HA | 9 | 1.22 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:150:ALA:H | 3 | 1.22 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:150:ALA:H | 3 | 1.22 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:150:ALA:H | 3 | 1.22 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 13 | 1.22 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 13 | 1.22 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 13 | 1.22 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:HA | 8 | 1.22 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:HA | 8 | 1.22 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:HA | 8 | 1.22 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 1 | 1.22 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 1 | 1.22 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 1 | 1.22 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 2 | 1.22 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 2 | 1.22 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 2 | 1.22 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 8 | 1.22 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 8 | 1.22 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 8 | 1.22 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:H | 11 | 1.22 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:H | 11 | 1.22 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:H | 11 | 1.22 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 4 | 1.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 4 | 1.22 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 4 | 1.22 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:131:ILE:HG13 | 1 | 1.22 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:131:ILE:HG13 | 1 | 1.22 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:131:ILE:HG13 | 1 | 1.22 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 8 | 1.22 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 8 | 1.22 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 8 | 1.22 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 7 | 1.21 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 7 | 1.21 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 7 | 1.21 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 11 | 1.21 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 11 | 1.21 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 11 | 1.21 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 3 | 1.21 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 3 | 1.21 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 3 | 1.21 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 13 | 1.21 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 13 | 1.21 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 13 | 1.21 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 11 | 1.21 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 11 | 1.21 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 11 | 1.21 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 11 | 1.21 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 11 | 1.21 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 11 | 1.21 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 18 | 1.21 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 18 | 1.21 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 18 | 1.21 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 18 | 1.21 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 18 | 1.21 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 18 | 1.21 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD1 | 10 | 1.21 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD2 | 10 | 1.21 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD1 | 10 | 1.21 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD2 | 10 | 1.21 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD1 | 10 | 1.21 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD2 | 10 | 1.21 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 3 | 1.21 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 3 | 1.21 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 3 | 1.21 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 3 | 1.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 3 | 1.21 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 3 | 1.21 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 19 | 1.21 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 19 | 1.21 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 19 | 1.21 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG11 | 19 | 1.21 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG12 | 19 | 1.21 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG13 | 19 | 1.21 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 5 | 1.21 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 5 | 1.21 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 5 | 1.21 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB2 | 11 | 1.21 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB2 | 11 | 1.21 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB2 | 11 | 1.21 |
| (1,2867) | 1:A:149:ASN:HB3 | 1:A:178:LYS:HE3 | 16 | 1.21 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 11 | 1.21 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 11 | 1.21 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 11 | 1.21 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 11 | 1.21 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 11 | 1.21 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 11 | 1.21 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 17 | 1.21 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 17 | 1.21 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 17 | 1.21 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 17 | 1.21 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 17 | 1.21 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 17 | 1.21 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 19 | 1.21 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 19 | 1.21 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 19 | 1.21 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 19 | 1.21 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 19 | 1.21 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 19 | 1.21 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB3 | 17 | 1.21 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB3 | 17 | 1.21 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB3 | 17 | 1.21 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 16 | 1.21 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 16 | 1.21 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 16 | 1.21 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HA | 19 | 1.21 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HA | 19 | 1.21 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HA | 19 | 1.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG11 | 15 | 1.21 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG12 | 15 | 1.21 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG13 | 15 | 1.21 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG11 | 15 | 1.21 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG12 | 15 | 1.21 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG13 | 15 | 1.21 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 15 | 1.21 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 15 | 1.21 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG13 | 15 | 1.21 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:H | 18 | 1.21 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:H | 18 | 1.21 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:H | 18 | 1.21 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 2 | 1.21 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 2 | 1.21 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 2 | 1.21 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 3 | 1.21 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 3 | 1.21 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 3 | 1.21 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HA | 4 | 1.21 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HA | 4 | 1.21 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HA | 4 | 1.21 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 17 | 1.21 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 17 | 1.21 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 17 | 1.21 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 17 | 1.21 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 17 | 1.21 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 17 | 1.21 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 17 | 1.21 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 17 | 1.21 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 17 | 1.21 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 10 | 1.21 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 10 | 1.21 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 10 | 1.21 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 2 | 1.21 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 2 | 1.21 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 2 | 1.21 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG21 | 5 | 1.21 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG22 | 5 | 1.21 |
| (1,1891) | 1:A:64:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG23 | 5 | 1.21 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG21 | 11 | 1.21 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG22 | 11 | 1.21 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG23 | 11 | 1.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 14 | 1.21 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 14 | 1.21 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 14 | 1.21 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 10 | 1.21 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 10 | 1.21 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 10 | 1.21 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 16 | 1.21 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 16 | 1.21 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 16 | 1.21 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG11 | 8 | 1.21 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG12 | 8 | 1.21 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG13 | 8 | 1.21 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG11 | 11 | 1.21 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG12 | 11 | 1.21 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG13 | 11 | 1.21 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 2 | 1.21 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 2 | 1.21 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 2 | 1.21 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:HA | 5 | 1.21 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:HA | 5 | 1.21 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:HA | 5 | 1.21 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG2 | 11 | 1.21 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG3 | 11 | 1.21 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG2 | 11 | 1.21 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG3 | 11 | 1.21 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 11 | 1.21 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 11 | 1.21 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HA | 16 | 1.21 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HA | 16 | 1.21 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HA | 16 | 1.21 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HA | 20 | 1.21 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HA | 20 | 1.21 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HA | 20 | 1.21 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 1 | 1.21 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 1 | 1.21 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 1 | 1.21 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 1 | 1.21 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 1 | 1.21 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 1 | 1.21 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 13 | 1.21 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 13 | 1.21 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 13 | 1.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 20 | 1.21 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 20 | 1.21 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 20 | 1.21 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 10 | 1.2 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 14 | 1.2 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 19 | 1.2 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 19 | 1.2 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 19 | 1.2 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 19 | 1.2 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 19 | 1.2 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 19 | 1.2 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 19 | 1.2 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 19 | 1.2 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 19 | 1.2 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 12 | 1.2 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 12 | 1.2 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 12 | 1.2 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 12 | 1.2 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 12 | 1.2 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 12 | 1.2 |
| (1,3512) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:120:SER:HB3 | 19 | 1.2 |
| (1,3512) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:120:SER:HB3 | 19 | 1.2 |
| (1,3512) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:120:SER:HB3 | 19 | 1.2 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:H | 4 | 1.2 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:H | 4 | 1.2 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:H | 4 | 1.2 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 5 | 1.2 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 5 | 1.2 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 5 | 1.2 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 5 | 1.2 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 5 | 1.2 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 5 | 1.2 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 15 | 1.2 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 15 | 1.2 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 15 | 1.2 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 15 | 1.2 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 15 | 1.2 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 15 | 1.2 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 14 | 1.2 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 14 | 1.2 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 14 | 1.2 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 15 | 1.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 15 | 1.2 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 15 | 1.2 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 1.2 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 1.2 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 1.2 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 3 | 1.2 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG21 | 20 | 1.2 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG22 | 20 | 1.2 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG23 | 20 | 1.2 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG21 | 20 | 1.2 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG22 | 20 | 1.2 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG23 | 20 | 1.2 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG21 | 20 | 1.2 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG22 | 20 | 1.2 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG23 | 20 | 1.2 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 8 | 1.2 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 8 | 1.2 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 8 | 1.2 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 17 | 1.2 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 17 | 1.2 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 17 | 1.2 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 14 | 1.2 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 14 | 1.2 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 14 | 1.2 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 12 | 1.2 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 12 | 1.2 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 12 | 1.2 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 18 | 1.2 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 18 | 1.2 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 18 | 1.2 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 1 | 1.2 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 1 | 1.2 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 1 | 1.2 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 9 | 1.2 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 9 | 1.2 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 9 | 1.2 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG11 | 13 | 1.2 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG12 | 13 | 1.2 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG13 | 13 | 1.2 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:150:ALA:H | 4 | 1.2 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:150:ALA:H | 4 | 1.2 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:150:ALA:H | 4 | 1.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:150:ALA:H | 13 | 1.2 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:150:ALA:H | 13 | 1.2 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:150:ALA:H | 13 | 1.2 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 8 | 1.2 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 8 | 1.2 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 8 | 1.2 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 4 | 1.2 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 4 | 1.2 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 4 | 1.2 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 4 | 1.2 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 9 | 1.2 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 9 | 1.19 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 9 | 1.19 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 9 | 1.19 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 17 | 1.19 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 17 | 1.19 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 17 | 1.19 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 11 | 1.19 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 11 | 1.19 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 11 | 1.19 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 1 | 1.19 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 1 | 1.19 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 1 | 1.19 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 6 | 1.19 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 6 | 1.19 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 6 | 1.19 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 13 | 1.19 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 13 | 1.19 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 13 | 1.19 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 13 | 1.19 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 13 | 1.19 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 13 | 1.19 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD1 | 2 | 1.19 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD2 | 2 | 1.19 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD1 | 2 | 1.19 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD2 | 2 | 1.19 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD1 | 2 | 1.19 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD2 | 2 | 1.19 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD1 | 17 | 1.19 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HD2 | 17 | 1.19 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD1 | 17 | 1.19 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HD2 | 17 | 1.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD1 | 17 | 1.19 |
| (1,3841) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HD2 | 17 | 1.19 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 8 | 1.19 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 8 | 1.19 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 8 | 1.19 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 8 | 1.19 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 8 | 1.19 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 8 | 1.19 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 7 | 1.19 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 7 | 1.19 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 7 | 1.19 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 7 | 1.19 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 7 | 1.19 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 7 | 1.19 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 17 | 1.19 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 17 | 1.19 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 17 | 1.19 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 4 | 1.19 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 4 | 1.19 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 4 | 1.19 |
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 15 | 1.19 |
| (1,3072) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:130:THR:HB | 7 | 1.19 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 5 | 1.19 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 6 | 1.19 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 1 | 1.19 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 1 | 1.19 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 1 | 1.19 |
| (1,2745) | 1:A:104:LEU:HB2 | 1:A:108:GLY:HA3 | 14 | 1.19 |
| (1,2745) | 1:A:104:LEU:HB2 | 1:A:108:GLY:HA3 | 20 | 1.19 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 7 | 1.19 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 7 | 1.19 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 7 | 1.19 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HA | 18 | 1.19 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HA | 18 | 1.19 |
| (1,2606) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HA | 18 | 1.19 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 1.19 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 1.19 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 1.19 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 1.19 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 1.19 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 1.19 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 1.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 1.19 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 1.19 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 8 | 1.19 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 8 | 1.19 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 8 | 1.19 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 11 | 1.19 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 11 | 1.19 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 11 | 1.19 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:134:GLN:HE22 | 3 | 1.19 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:134:GLN:HE22 | 3 | 1.19 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:134:GLN:HE22 | 3 | 1.19 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 5 | 1.19 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 5 | 1.19 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 5 | 1.19 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 19 | 1.19 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 19 | 1.19 |
| (1,1852) | 1:A:64:ASN:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 19 | 1.19 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG21 | 3 | 1.19 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG22 | 3 | 1.19 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG23 | 3 | 1.19 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 19 | 1.19 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 19 | 1.19 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 19 | 1.19 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 13 | 1.19 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 13 | 1.19 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 13 | 1.19 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB2 | 10 | 1.19 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB3 | 10 | 1.19 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB2 | 10 | 1.19 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB3 | 10 | 1.19 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB2 | 10 | 1.19 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB3 | 10 | 1.19 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG11 | 5 | 1.19 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG12 | 5 | 1.19 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG13 | 5 | 1.19 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG11 | 17 | 1.19 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG12 | 17 | 1.19 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG13 | 17 | 1.19 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:HA | 3 | 1.19 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:HA | 3 | 1.19 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:HA | 3 | 1.19 |
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 17 | 1.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 8 | 1.18 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 8 | 1.18 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 8 | 1.18 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 19 | 1.18 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 19 | 1.18 |
| (1,3724) | 1:A:77:ALA:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 19 | 1.18 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 18 | 1.18 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 15 | 1.18 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 15 | 1.18 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 15 | 1.18 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG11 | 15 | 1.18 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG12 | 15 | 1.18 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG13 | 15 | 1.18 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB2 | 16 | 1.18 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB2 | 16 | 1.18 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB2 | 16 | 1.18 |
| (1,331) | 1:A:150:ALA:H | 1:A:178:LYS:HE3 | 1 | 1.18 |
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 12 | 1.18 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 19 | 1.18 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 19 | 1.18 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 19 | 1.18 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 1.18 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 1.18 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 1.18 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 5 | 1.18 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 5 | 1.18 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 5 | 1.18 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 12 | 1.18 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 12 | 1.18 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 12 | 1.18 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 17 | 1.18 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 17 | 1.18 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 17 | 1.18 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 3 | 1.18 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 3 | 1.18 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 3 | 1.18 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 15 | 1.18 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 15 | 1.18 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 15 | 1.18 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 2 | 1.18 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 2 | 1.18 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 2 | 1.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:H | 7 | 1.18 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:H | 7 | 1.18 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:H | 7 | 1.18 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 3 | 1.18 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 3 | 1.18 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 3 | 1.18 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB2 | 19 | 1.18 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB3 | 19 | 1.18 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB2 | 19 | 1.18 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB3 | 19 | 1.18 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB2 | 19 | 1.18 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB3 | 19 | 1.18 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG11 | 2 | 1.18 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG12 | 2 | 1.18 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG13 | 2 | 1.18 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG11 | 15 | 1.18 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG12 | 15 | 1.18 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG13 | 15 | 1.18 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 2 | 1.18 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 2 | 1.18 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 2 | 1.18 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG2 | 14 | 1.18 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG3 | 14 | 1.18 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG2 | 14 | 1.18 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG3 | 14 | 1.18 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 14 | 1.18 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 14 | 1.18 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HA | 10 | 1.18 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HA | 10 | 1.18 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HA | 10 | 1.18 |
| (1,1310) | 1:A:67:SER:HA | 1:A:124:LEU:HD11 | 9 | 1.18 |
| (1,1310) | 1:A:67:SER:HA | 1:A:124:LEU:HD12 | 9 | 1.18 |
| (1,1310) | 1:A:67:SER:HA | 1:A:124:LEU:HD13 | 9 | 1.18 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HA | 11 | 1.18 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HA | 11 | 1.18 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HA | 11 | 1.18 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 19 | 1.18 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 19 | 1.18 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 19 | 1.18 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 6 | 1.17 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 6 | 1.17 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 6 | 1.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 15 | 1.17 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 5 | 1.17 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 6 | 1.17 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 10 | 1.17 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 10 | 1.17 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 10 | 1.17 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 11 | 1.17 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 11 | 1.17 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 11 | 1.17 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 9 | 1.17 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 9 | 1.17 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 9 | 1.17 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 9 | 1.17 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 9 | 1.17 |
| (1,3924) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 9 | 1.17 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 20 | 1.17 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 20 | 1.17 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 20 | 1.17 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 4 | 1.17 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 12 | 1.17 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 13 | 1.17 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 1 | 1.17 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 1 | 1.17 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 1 | 1.17 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 2 | 1.17 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 2 | 1.17 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 2 | 1.17 |
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 13 | 1.17 |
| (1,3072) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:130:THR:HB | 6 | 1.17 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 9 | 1.17 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 9 | 1.17 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 9 | 1.17 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 1.17 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 1.17 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 1.17 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 1.17 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 1.17 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 1.17 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 1.17 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 1.17 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 1.17 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 4 | 1.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 4 | 1.17 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 4 | 1.17 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD21 | 20 | 1.17 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD22 | 20 | 1.17 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD23 | 20 | 1.17 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD21 | 20 | 1.17 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD22 | 20 | 1.17 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD23 | 20 | 1.17 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD21 | 20 | 1.17 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD22 | 20 | 1.17 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD23 | 20 | 1.17 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 1 | 1.17 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 1 | 1.17 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 1 | 1.17 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 1 | 1.17 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 1 | 1.17 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 1 | 1.17 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 1 | 1.17 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 1 | 1.17 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 1 | 1.17 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 16 | 1.17 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 16 | 1.17 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 16 | 1.17 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 1.17 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 1.17 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 1.17 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 1.17 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 1.17 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 1.17 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 1.17 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 1.17 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 1.17 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 9 | 1.17 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 9 | 1.17 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 9 | 1.17 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 12 | 1.17 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 12 | 1.17 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 12 | 1.17 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:H | 8 | 1.17 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:H | 8 | 1.17 |
| (1,1672) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:H | 8 | 1.17 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HZ | 10 | 1.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HZ | 10 | 1.17 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HZ | 10 | 1.17 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG11 | 4 | 1.17 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG12 | 4 | 1.17 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG13 | 4 | 1.17 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG11 | 3 | 1.17 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG12 | 3 | 1.17 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG13 | 3 | 1.17 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG11 | 7 | 1.17 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG12 | 7 | 1.17 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG13 | 7 | 1.17 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG11 | 10 | 1.17 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG12 | 10 | 1.17 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG13 | 10 | 1.17 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG11 | 19 | 1.17 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG12 | 19 | 1.17 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG13 | 19 | 1.17 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HA | 8 | 1.17 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HA | 8 | 1.17 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HA | 8 | 1.17 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 8 | 1.16 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 8 | 1.16 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 8 | 1.16 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 9 | 1.16 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 9 | 1.16 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 9 | 1.16 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD1 | 9 | 1.16 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD2 | 9 | 1.16 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD1 | 9 | 1.16 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD2 | 9 | 1.16 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD1 | 9 | 1.16 |
| (1,3874) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD2 | 9 | 1.16 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 11 | 1.16 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 11 | 1.16 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 6 | 1.16 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 6 | 1.16 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 6 | 1.16 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 16 | 1.16 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 16 | 1.16 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 16 | 1.16 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 20 | 1.16 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 11 | 1.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 10 | 1.16 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 11 | 1.16 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 11 | 1.16 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 11 | 1.16 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 12 | 1.16 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 12 | 1.16 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 12 | 1.16 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE2 | 7 | 1.16 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE2 | 7 | 1.16 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE2 | 7 | 1.16 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 18 | 1.16 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 18 | 1.16 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 18 | 1.16 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG21 | 8 | 1.16 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG22 | 8 | 1.16 |
| (1,2617) | 1:A:145:PRO:HD2 | 1:A:181:VAL:HG23 | 8 | 1.16 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 2 | 1.16 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 2 | 1.16 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 2 | 1.16 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 18 | 1.16 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 18 | 1.16 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 18 | 1.16 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:H | 9 | 1.16 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:H | 9 | 1.16 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:H | 9 | 1.16 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 1.16 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 1.16 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 1.16 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 3 | 1.16 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG11 | 13 | 1.16 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG12 | 13 | 1.16 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG13 | 13 | 1.16 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG11 | 14 | 1.16 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG12 | 14 | 1.16 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG13 | 14 | 1.16 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG11 | 18 | 1.16 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG12 | 18 | 1.16 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG13 | 18 | 1.16 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 6 | 1.16 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 6 | 1.16 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 6 | 1.16 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 13 | 1.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 13 | 1.16 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 13 | 1.16 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 17 | 1.16 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 17 | 1.16 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 17 | 1.16 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB2 | 15 | 1.16 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB3 | 15 | 1.16 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB2 | 15 | 1.16 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB3 | 15 | 1.16 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB2 | 15 | 1.16 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB3 | 15 | 1.16 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HZ | 8 | 1.16 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HZ | 8 | 1.16 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HZ | 8 | 1.16 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG11 | 8 | 1.16 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG12 | 8 | 1.16 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG13 | 8 | 1.16 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG11 | 9 | 1.16 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG12 | 9 | 1.16 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG13 | 9 | 1.16 |
| (1,1585) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:112:THR:H | 20 | 1.16 |
| (1,1585) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:112:THR:H | 20 | 1.16 |
| (1,1585) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:112:THR:H | 20 | 1.16 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 20 | 1.16 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 20 | 1.16 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 20 | 1.16 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 20 | 1.16 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 20 | 1.16 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 20 | 1.16 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 20 | 1.16 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 20 | 1.16 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 20 | 1.16 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 15 | 1.16 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 15 | 1.16 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 15 | 1.16 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 18 | 1.16 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 18 | 1.16 |
| (1,1153) | 1:A:83:THR:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 18 | 1.16 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 15 | 1.16 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 13 | 1.15 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 13 | 1.15 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 13 | 1.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 14 | 1.15 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 14 | 1.15 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 14 | 1.15 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:54:PHE:H | 20 | 1.15 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:54:PHE:H | 20 | 1.15 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:54:PHE:H | 20 | 1.15 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 11 | 1.15 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 13 | 1.15 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 14 | 1.15 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 14 | 1.15 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 14 | 1.15 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE1 | 8 | 1.15 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE2 | 8 | 1.15 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE1 | 8 | 1.15 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE2 | 8 | 1.15 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE1 | 8 | 1.15 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE2 | 8 | 1.15 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE1 | 10 | 1.15 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE2 | 10 | 1.15 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE1 | 10 | 1.15 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE2 | 10 | 1.15 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE1 | 10 | 1.15 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE2 | 10 | 1.15 |
| (1,387) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:H | 4 | 1.15 |
| (1,387) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:H | 4 | 1.15 |
| (1,387) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:H | 4 | 1.15 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 8 | 1.15 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 12 | 1.15 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 12 | 1.15 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 12 | 1.15 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG11 | 12 | 1.15 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG12 | 12 | 1.15 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG13 | 12 | 1.15 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 9 | 1.15 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 9 | 1.15 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 9 | 1.15 |
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 5 | 1.15 |
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 17 | 1.15 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 3 | 1.15 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 3 | 1.15 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 3 | 1.15 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 19 | 1.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 19 | 1.15 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 19 | 1.15 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 1.15 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 1.15 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 1.15 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 1.15 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 1.15 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 1.15 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 1.15 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 1.15 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 1.15 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 17 | 1.15 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 17 | 1.15 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 17 | 1.15 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 16 | 1.15 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 16 | 1.15 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 16 | 1.15 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 16 | 1.15 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 16 | 1.15 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 16 | 1.15 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 16 | 1.15 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 16 | 1.15 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 16 | 1.15 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 1.15 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 1.15 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 1.15 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 7 | 1.15 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG11 | 10 | 1.15 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG12 | 10 | 1.15 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG13 | 10 | 1.15 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 3 | 1.15 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 3 | 1.15 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 3 | 1.15 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 1.15 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 1.15 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 1.15 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 1.15 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 1.15 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 1.15 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 1.15 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 1.15 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 1.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:156:VAL:HG21 | 5 | 1.15 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:156:VAL:HG22 | 5 | 1.15 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:156:VAL:HG23 | 5 | 1.15 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:156:VAL:HG21 | 5 | 1.15 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:156:VAL:HG22 | 5 | 1.15 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:156:VAL:HG23 | 5 | 1.15 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:156:VAL:HG21 | 5 | 1.15 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:156:VAL:HG22 | 5 | 1.15 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:156:VAL:HG23 | 5 | 1.15 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 2 | 1.15 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 2 | 1.15 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 2 | 1.15 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 17 | 1.15 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 17 | 1.15 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 17 | 1.15 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 7 | 1.15 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 7 | 1.15 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 7 | 1.15 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG11 | 6 | 1.15 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG12 | 6 | 1.15 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG13 | 6 | 1.15 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HA | 5 | 1.15 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HA | 5 | 1.15 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HA | 5 | 1.15 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HA | 7 | 1.15 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HA | 7 | 1.15 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HA | 7 | 1.15 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 3 | 1.15 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 3 | 1.15 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 3 | 1.15 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 17 | 1.15 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 17 | 1.15 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 17 | 1.15 |
| (1,135) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:H | 10 | 1.15 |
| (1,135) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:H | 10 | 1.15 |
| (1,135) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:H | 10 | 1.15 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 9 | 1.15 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 9 | 1.15 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 9 | 1.15 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 9 | 1.15 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 9 | 1.15 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 9 | 1.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 1 | 1.15 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 18 | 1.15 |
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 1 | 1.14 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 9 | 1.14 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 9 | 1.14 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 9 | 1.14 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 16 | 1.14 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 16 | 1.14 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 16 | 1.14 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 16 | 1.14 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 16 | 1.14 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 16 | 1.14 |
| (1,3775) | 1:A:106:ARG:HG3 | 1:A:120:SER:HB2 | 16 | 1.14 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 20 | 1.14 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 20 | 1.14 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 20 | 1.14 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 2 | 1.14 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 3 | 1.14 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 3 | 1.14 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 3 | 1.14 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 12 | 1.14 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 18 | 1.14 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 18 | 1.14 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 18 | 1.14 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG11 | 18 | 1.14 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG12 | 18 | 1.14 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG13 | 18 | 1.14 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 8 | 1.14 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 13 | 1.14 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 8 | 1.14 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HB | 4 | 1.14 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HB | 4 | 1.14 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HB | 4 | 1.14 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 1.14 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 1.14 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 1.14 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 1.14 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 1.14 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 1.14 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 1.14 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 1.14 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 1.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 15 | 1.14 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 15 | 1.14 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 15 | 1.14 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 15 | 1.14 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 15 | 1.14 |
| (1,2329) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 15 | 1.14 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 13 | 1.14 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 13 | 1.14 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 13 | 1.14 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 13 | 1.14 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 13 | 1.14 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 13 | 1.14 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 13 | 1.14 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 13 | 1.14 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 13 | 1.14 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 1.14 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 1.14 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 1.14 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG11 | 20 | 1.14 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG12 | 20 | 1.14 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG13 | 20 | 1.14 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG21 | 1:A:124:LEU:HD21 | 13 | 1.14 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG21 | 1:A:124:LEU:HD22 | 13 | 1.14 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG21 | 1:A:124:LEU:HD23 | 13 | 1.14 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG22 | 1:A:124:LEU:HD21 | 13 | 1.14 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG22 | 1:A:124:LEU:HD22 | 13 | 1.14 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG22 | 1:A:124:LEU:HD23 | 13 | 1.14 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG23 | 1:A:124:LEU:HD21 | 13 | 1.14 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG23 | 1:A:124:LEU:HD22 | 13 | 1.14 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG23 | 1:A:124:LEU:HD23 | 13 | 1.14 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 1.14 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 1.14 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 1.14 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 1.14 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 1.14 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 1.14 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 1.14 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 1.14 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 1.14 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 1.14 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 1.14 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 1.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 1.14 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 1.14 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 1.14 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 10 | 1.14 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 10 | 1.14 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 10 | 1.14 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 17 | 1.14 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 17 | 1.14 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 17 | 1.14 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 7 | 1.14 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 7 | 1.14 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 7 | 1.14 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 7 | 1.14 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 7 | 1.14 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 7 | 1.14 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 8 | 1.14 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 8 | 1.14 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 8 | 1.14 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 8 | 1.14 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 8 | 1.14 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 8 | 1.14 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:28:VAL:H | 16 | 1.14 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:28:VAL:H | 16 | 1.14 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:28:VAL:H | 16 | 1.14 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 4 | 1.14 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 4 | 1.14 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 4 | 1.14 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 12 | 1.14 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 12 | 1.14 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 12 | 1.14 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HA | 12 | 1.14 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HA | 12 | 1.14 |
| (1,1563) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HA | 12 | 1.14 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 15 | 1.14 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 15 | 1.14 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 15 | 1.14 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG2 | 5 | 1.14 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG3 | 5 | 1.14 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG2 | 5 | 1.14 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG3 | 5 | 1.14 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 5 | 1.14 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 5 | 1.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE22 | 2 | 1.14 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE22 | 2 | 1.14 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE22 | 2 | 1.14 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:131:ILE:HG13 | 2 | 1.14 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:131:ILE:HG13 | 2 | 1.14 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:131:ILE:HG13 | 2 | 1.14 |
| (1,1094) | 1:A:157:GLN:HB2 | 1:A:159:GLN:HE21 | 7 | 1.14 |
| (1,1094) | 1:A:157:GLN:HB2 | 1:A:159:GLN:HE21 | 17 | 1.14 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 5 | 1.13 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 5 | 1.13 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 5 | 1.13 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 7 | 1.13 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 7 | 1.13 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 7 | 1.13 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 19 | 1.13 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 19 | 1.13 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 19 | 1.13 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 1 | 1.13 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HE1 | 16 | 1.13 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HE2 | 16 | 1.13 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HE1 | 16 | 1.13 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HE2 | 16 | 1.13 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HE1 | 16 | 1.13 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HE2 | 16 | 1.13 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 6 | 1.13 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 16 | 1.13 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 10 | 1.13 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 14 | 1.13 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 17 | 1.13 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 18 | 1.13 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 13 | 1.13 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 13 | 1.13 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 13 | 1.13 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 18 | 1.13 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 18 | 1.13 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 18 | 1.13 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 4 | 1.13 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 4 | 1.13 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 4 | 1.13 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE2 | 17 | 1.13 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE2 | 17 | 1.13 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE2 | 17 | 1.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 2 | 1.13 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 2 | 1.13 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 2 | 1.13 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 2 | 1.13 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 2 | 1.13 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 2 | 1.13 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 19 | 1.13 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 6 | 1.13 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 6 | 1.13 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 6 | 1.13 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 14 | 1.13 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 14 | 1.13 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 14 | 1.13 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 17 | 1.13 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 17 | 1.13 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 17 | 1.13 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 17 | 1.13 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 17 | 1.13 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 17 | 1.13 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 17 | 1.13 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 17 | 1.13 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 17 | 1.13 |
| (1,1939) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HB3 | 13 | 1.13 |
| (1,1939) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HB3 | 13 | 1.13 |
| (1,1939) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HB3 | 13 | 1.13 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 1.13 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 1.13 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 1.13 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG11 | 4 | 1.13 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG12 | 4 | 1.13 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG13 | 4 | 1.13 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG11 | 18 | 1.13 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG12 | 18 | 1.13 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG13 | 18 | 1.13 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 3 | 1.13 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 3 | 1.13 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 3 | 1.13 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG2 | 18 | 1.13 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG3 | 18 | 1.13 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG2 | 18 | 1.13 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG3 | 18 | 1.13 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 18 | 1.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 18 | 1.13 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HA | 18 | 1.13 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HA | 18 | 1.13 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HA | 18 | 1.13 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 18 | 1.13 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 18 | 1.13 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 18 | 1.13 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 17 | 1.13 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 17 | 1.13 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 17 | 1.13 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 17 | 1.13 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 17 | 1.13 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 17 | 1.13 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 17 | 1.13 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 17 | 1.13 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 17 | 1.13 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG11 | 8 | 1.12 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG12 | 8 | 1.12 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG13 | 8 | 1.12 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 8 | 1.12 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 8 | 1.12 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 8 | 1.12 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 17 | 1.12 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 17 | 1.12 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 17 | 1.12 |
| (1,495) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:15:GLU:H | 2 | 1.12 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG21 | 2 | 1.12 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG22 | 2 | 1.12 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG23 | 2 | 1.12 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 20 | 1.12 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 20 | 1.12 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 20 | 1.12 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 20 | 1.12 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 20 | 1.12 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 20 | 1.12 |
| (1,3934) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:138:PHE:HZ | 20 | 1.12 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 2 | 1.12 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 2 | 1.12 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 2 | 1.12 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 7 | 1.12 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 9 | 1.12 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 10 | 1.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 1.12 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 1.12 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 1.12 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 1.12 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 1.12 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 1.12 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 1.12 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 1.12 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 1.12 |
| (1,3242) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HB | 9 | 1.12 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 19 | 1.12 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 20 | 1.12 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB3 | 19 | 1.12 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB3 | 19 | 1.12 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB3 | 19 | 1.12 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 15 | 1.12 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 17 | 1.12 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 17 | 1.12 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 17 | 1.12 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 1.12 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 1.12 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 1.12 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 1.12 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 1.12 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 1.12 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 1.12 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 1.12 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 1.12 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:H | 3 | 1.12 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:H | 3 | 1.12 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:H | 3 | 1.12 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:H | 5 | 1.12 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:H | 5 | 1.12 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:H | 5 | 1.12 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:H | 17 | 1.12 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:H | 17 | 1.12 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:H | 17 | 1.12 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 8 | 1.12 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 8 | 1.12 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 8 | 1.12 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 20 | 1.12 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HA | 18 | 1.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HA | 18 | 1.12 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HA | 18 | 1.12 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG21 | 10 | 1.12 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG22 | 10 | 1.12 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG23 | 10 | 1.12 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG21 | 10 | 1.12 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG22 | 10 | 1.12 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG23 | 10 | 1.12 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG21 | 10 | 1.12 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG22 | 10 | 1.12 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG23 | 10 | 1.12 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 19 | 1.12 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 19 | 1.12 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 19 | 1.12 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 10 | 1.12 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 10 | 1.12 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 10 | 1.12 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG11 | 19 | 1.12 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG12 | 19 | 1.12 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG13 | 19 | 1.12 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG11 | 6 | 1.12 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG12 | 6 | 1.12 |
| (1,1652) | 1:A:100:GLY:HA3 | 1:A:101:VAL:HG13 | 6 | 1.12 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 17 | 1.12 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 17 | 1.12 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 17 | 1.12 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HA | 14 | 1.12 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HA | 14 | 1.12 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HA | 14 | 1.12 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 10 | 1.12 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 10 | 1.12 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 10 | 1.12 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 20 | 1.12 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 20 | 1.12 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 20 | 1.12 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 20 | 1.12 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 20 | 1.12 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 20 | 1.12 |
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 4 | 1.11 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 12 | 1.11 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 12 | 1.11 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 12 | 1.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 13 | 1.11 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 13 | 1.11 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 13 | 1.11 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 18 | 1.11 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 18 | 1.11 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 18 | 1.11 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 9 | 1.11 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG11 | 15 | 1.11 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG12 | 15 | 1.11 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:175:VAL:HG13 | 15 | 1.11 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG11 | 15 | 1.11 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG12 | 15 | 1.11 |
| (1,3840) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:175:VAL:HG13 | 15 | 1.11 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 17 | 1.11 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 17 | 1.11 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 17 | 1.11 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 17 | 1.11 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 20 | 1.11 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 14 | 1.11 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 14 | 1.11 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 14 | 1.11 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 19 | 1.11 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 19 | 1.11 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 19 | 1.11 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 2 | 1.11 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 2 | 1.11 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 2 | 1.11 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 19 | 1.11 |
| (1,3056) | 1:A:69:ALA:H | 1:A:121:GLU:HG2 | 18 | 1.11 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 18 | 1.11 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 13 | 1.11 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 13 | 1.11 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 13 | 1.11 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG11 | 2 | 1.11 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG12 | 2 | 1.11 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG13 | 2 | 1.11 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG11 | 2 | 1.11 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG12 | 2 | 1.11 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG13 | 2 | 1.11 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 2 | 1.11 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 2 | 1.11 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG13 | 2 | 1.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG11 | 17 | 1.11 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG12 | 17 | 1.11 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG13 | 17 | 1.11 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG11 | 17 | 1.11 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG12 | 17 | 1.11 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG13 | 17 | 1.11 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 17 | 1.11 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 17 | 1.11 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG13 | 17 | 1.11 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 2 | 1.11 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 2 | 1.11 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 2 | 1.11 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 2 | 1.11 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 2 | 1.11 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 2 | 1.11 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 2 | 1.11 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 2 | 1.11 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 2 | 1.11 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 6 | 1.11 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 6 | 1.11 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 6 | 1.11 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 6 | 1.11 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 6 | 1.11 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 6 | 1.11 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 6 | 1.11 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 6 | 1.11 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 6 | 1.11 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 1 | 1.11 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 1 | 1.11 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 1 | 1.11 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 2 | 1.11 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 2 | 1.11 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 2 | 1.11 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:150:ALA:H | 10 | 1.11 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:150:ALA:H | 10 | 1.11 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:150:ALA:H | 10 | 1.11 |
| (1,1585) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:112:THR:H | 16 | 1.11 |
| (1,1585) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:112:THR:H | 16 | 1.11 |
| (1,1585) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:112:THR:H | 16 | 1.11 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 19 | 1.11 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 19 | 1.11 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 19 | 1.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HA | 11 | 1.11 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HA | 11 | 1.11 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HA | 11 | 1.11 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 12 | 1.11 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 12 | 1.11 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 12 | 1.11 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 19 | 1.11 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 19 | 1.11 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 19 | 1.11 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 7 | 1.11 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 7 | 1.11 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 7 | 1.11 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 16 | 1.11 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 16 | 1.11 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 16 | 1.11 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 12 | 1.11 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 3 | 1.1 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 3 | 1.1 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 3 | 1.1 |
| (1,630) | 1:A:91:SER:HB2 | 1:A:95:SER:H | 4 | 1.1 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 16 | 1.1 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 16 | 1.1 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 16 | 1.1 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 20 | 1.1 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 20 | 1.1 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 20 | 1.1 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 14 | 1.1 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 14 | 1.1 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 14 | 1.1 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 14 | 1.1 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 14 | 1.1 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 14 | 1.1 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 15 | 1.1 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 15 | 1.1 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 15 | 1.1 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 15 | 1.1 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 15 | 1.1 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 15 | 1.1 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 1.1 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 1.1 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 1.1 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 1.1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 1.1 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 1.1 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 1.1 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 1.1 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 1.1 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 10 | 1.1 |
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 16 | 1.1 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HB | 13 | 1.1 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HB | 13 | 1.1 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HB | 13 | 1.1 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB1 | 1 | 1.1 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB2 | 1 | 1.1 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB3 | 1 | 1.1 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 3 | 1.1 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 3 | 1.1 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 3 | 1.1 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 10 | 1.1 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 10 | 1.1 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 10 | 1.1 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 19 | 1.1 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 19 | 1.1 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 19 | 1.1 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 1.1 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 1.1 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 1.1 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 1.1 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 1.1 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 1.1 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 1.1 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 1.1 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 1.1 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 1.1 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 1.1 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 1.1 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 6 | 1.1 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 6 | 1.1 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 6 | 1.1 |
| (1,1585) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:112:THR:H | 18 | 1.1 |
| (1,1585) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:112:THR:H | 18 | 1.1 |
| (1,1585) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:112:THR:H | 18 | 1.1 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG2 | 8 | 1.1 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG3 | 8 | 1.1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG2 | 8 | 1.1 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG3 | 8 | 1.1 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 8 | 1.1 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 8 | 1.1 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 8 | 1.1 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 8 | 1.1 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 8 | 1.1 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB2 | 17 | 1.1 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB2 | 17 | 1.1 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB2 | 17 | 1.1 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:131:ILE:HG13 | 14 | 1.1 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:131:ILE:HG13 | 14 | 1.1 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:131:ILE:HG13 | 14 | 1.1 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 18 | 1.09 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 18 | 1.09 |
| (1,829) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 18 | 1.09 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 2 | 1.09 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 16 | 1.09 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 16 | 1.09 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 16 | 1.09 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 8 | 1.09 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 8 | 1.09 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 8 | 1.09 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 5 | 1.09 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 5 | 1.09 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 5 | 1.09 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 5 | 1.09 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 5 | 1.09 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 5 | 1.09 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE1 | 11 | 1.09 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE2 | 11 | 1.09 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE1 | 11 | 1.09 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE2 | 11 | 1.09 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE1 | 11 | 1.09 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE2 | 11 | 1.09 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 9 | 1.09 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 9 | 1.09 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 9 | 1.09 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 9 | 1.09 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 9 | 1.09 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 9 | 1.09 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 7 | 1.09 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 7 | 1.09 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 18 | 1.09 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 18 | 1.09 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:HB | 4 | 1.09 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:HB | 4 | 1.09 |
| (1,3786) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:HB | 4 | 1.09 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 19 | 1.09 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 5 | 1.09 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 5 | 1.09 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 5 | 1.09 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 17 | 1.09 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 17 | 1.09 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 17 | 1.09 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 14 | 1.09 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 4 | 1.09 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG21 | 11 | 1.09 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG22 | 11 | 1.09 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG23 | 11 | 1.09 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB1 | 13 | 1.09 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB2 | 13 | 1.09 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB3 | 13 | 1.09 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 16 | 1.09 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 16 | 1.09 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 16 | 1.09 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 12 | 1.09 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 12 | 1.09 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 12 | 1.09 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 12 | 1.09 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 12 | 1.09 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 12 | 1.09 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 12 | 1.09 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 12 | 1.09 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 12 | 1.09 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 20 | 1.09 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 20 | 1.09 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 20 | 1.09 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 20 | 1.09 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 20 | 1.09 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 20 | 1.09 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 20 | 1.09 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 20 | 1.09 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 20 | 1.09 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:H | 13 | 1.09 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:H | 13 | 1.09 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:H | 13 | 1.09 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 2 | 1.09 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 10 | 1.09 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 2 | 1.09 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 2 | 1.09 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 2 | 1.09 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 1.09 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 1.09 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 1.09 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 8 | 1.09 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 8 | 1.09 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 8 | 1.09 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 13 | 1.09 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 13 | 1.09 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 13 | 1.09 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 3 | 1.09 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 3 | 1.09 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 3 | 1.09 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 4 | 1.09 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 4 | 1.09 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 4 | 1.09 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG11 | 11 | 1.09 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG12 | 11 | 1.09 |
| (1,1654) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:101:VAL:HG13 | 11 | 1.09 |
| (1,1467) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:LYS:HG2 | 2 | 1.09 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 11 | 1.09 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 11 | 1.09 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 11 | 1.09 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB2 | 20 | 1.09 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB2 | 20 | 1.09 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB2 | 20 | 1.09 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 2 | 1.09 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 4 | 1.08 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 4 | 1.08 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 4 | 1.08 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 4 | 1.08 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 4 | 1.08 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 4 | 1.08 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 4 | 1.08 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 4 | 1.08 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 4 | 1.08 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 9 | 1.08 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 9 | 1.08 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 9 | 1.08 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 9 | 1.08 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 9 | 1.08 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 9 | 1.08 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 11 | 1.08 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 11 | 1.08 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 11 | 1.08 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 11 | 1.08 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 15 | 1.08 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 15 | 1.08 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 15 | 1.08 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 1 | 1.08 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 1 | 1.08 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 1 | 1.08 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 10 | 1.08 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 10 | 1.08 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 10 | 1.08 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 16 | 1.08 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 16 | 1.08 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 16 | 1.08 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 14 | 1.08 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 14 | 1.08 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 14 | 1.08 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 13 | 1.08 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 13 | 1.08 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 13 | 1.08 |
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 8 | 1.08 |
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 20 | 1.08 |
| (1,2864) | 1:A:89:GLN:HE21 | 1:A:178:LYS:HE3 | 2 | 1.08 |
| (1,2864) | 1:A:89:GLN:HE21 | 1:A:178:LYS:HE3 | 16 | 1.08 |
| (1,2858) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:29:ASP:HB3 | 3 | 1.08 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 2 | 1.08 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG21 | 4 | 1.08 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG22 | 4 | 1.08 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG23 | 4 | 1.08 |
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 17 | 1.08 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 8 | 1.08 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 1.08 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 1.08 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 1.08 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 1.08 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 1.08 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 1.08 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 1.08 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 1.08 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 1.08 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 4 | 1.08 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 4 | 1.08 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 4 | 1.08 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 8 | 1.08 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HA | 20 | 1.08 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HA | 20 | 1.08 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HA | 20 | 1.08 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 6 | 1.08 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 6 | 1.08 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 6 | 1.08 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 13 | 1.08 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 13 | 1.08 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 13 | 1.08 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 5 | 1.08 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 12 | 1.08 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 12 | 1.08 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 12 | 1.08 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 8 | 1.08 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 8 | 1.08 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 8 | 1.08 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 1.08 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 1.08 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 1.08 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 5 | 1.08 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 5 | 1.08 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 5 | 1.08 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 5 | 1.08 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 5 | 1.08 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 5 | 1.08 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 20 | 1.08 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 20 | 1.08 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 20 | 1.08 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 5 | 1.08 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 5 | 1.08 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 5 | 1.08 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 20 | 1.08 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 20 | 1.08 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 20 | 1.08 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:149:ASN:HA | 18 | 1.08 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:149:ASN:HA | 18 | 1.08 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:149:ASN:HA | 18 | 1.08 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG2 | 1 | 1.08 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG3 | 1 | 1.08 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG2 | 1 | 1.08 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG3 | 1 | 1.08 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 1 | 1.08 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 1 | 1.08 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 5 | 1.08 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 5 | 1.08 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 5 | 1.08 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HA | 7 | 1.08 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HA | 7 | 1.08 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HA | 7 | 1.08 |
| (1,1050) | 1:A:98:ASN:HD22 | 1:A:141:GLY:HA2 | 13 | 1.08 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 19 | 1.08 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 2 | 1.07 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 2 | 1.07 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 2 | 1.07 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 15 | 1.07 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 15 | 1.07 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 15 | 1.07 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 7 | 1.07 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 6 | 1.07 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 6 | 1.07 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 6 | 1.07 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 6 | 1.07 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 6 | 1.07 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 6 | 1.07 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 3 | 1.07 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 4 | 1.07 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 4 | 1.07 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 4 | 1.07 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 10 | 1.07 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 10 | 1.07 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 10 | 1.07 |
| (1,3490) | 1:A:106:ARG:HB3 | 1:A:107:THR:HA | 20 | 1.07 |
| (1,3483) | 1:A:68:LYS:HD3 | 1:A:121:GLU:HG2 | 10 | 1.07 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 6 | 1.07 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 6 | 1.07 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 6 | 1.07 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 7 | 1.07 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 7 | 1.07 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 7 | 1.07 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 12 | 1.07 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 12 | 1.07 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 12 | 1.07 |
| (1,331) | 1:A:150:ALA:H | 1:A:178:LYS:HE3 | 4 | 1.07 |
| (1,331) | 1:A:150:ALA:H | 1:A:178:LYS:HE3 | 5 | 1.07 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 14 | 1.07 |
| (1,3024) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:159:GLN:HB3 | 10 | 1.07 |
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 7 | 1.07 |
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 8 | 1.07 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 7 | 1.07 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 7 | 1.07 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 7 | 1.07 |
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 15 | 1.07 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG21 | 3 | 1.07 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG22 | 3 | 1.07 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG23 | 3 | 1.07 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 1.07 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 1.07 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 1.07 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 1.07 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 1.07 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 1.07 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 1.07 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 1.07 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 1.07 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 1.07 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 1.07 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 1.07 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 1.07 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 1.07 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 1.07 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 1.07 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 1.07 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 1.07 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG11 | 12 | 1.07 |
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG12 | 12 | 1.07 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2415) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:182:VAL:HG13 | 12 | 1.07 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:H | 7 | 1.07 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:H | 7 | 1.07 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:H | 7 | 1.07 |
| (1,2165) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HA | 12 | 1.07 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 7 | 1.07 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 7 | 1.07 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 7 | 1.07 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG11 | 6 | 1.07 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG12 | 6 | 1.07 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG13 | 6 | 1.07 |
| (1,1975) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HB2 | 15 | 1.07 |
| (1,1975) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HB2 | 15 | 1.07 |
| (1,1975) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HB2 | 15 | 1.07 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 17 | 1.07 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 17 | 1.07 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 17 | 1.07 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HZ | 5 | 1.07 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HZ | 5 | 1.07 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HZ | 5 | 1.07 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:149:ASN:HA | 5 | 1.07 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:149:ASN:HA | 5 | 1.07 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:149:ASN:HA | 5 | 1.07 |
| (1,1609) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:124:LEU:HD11 | 10 | 1.07 |
| (1,1609) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:124:LEU:HD12 | 10 | 1.07 |
| (1,1609) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:124:LEU:HD13 | 10 | 1.07 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 14 | 1.07 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 14 | 1.07 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 14 | 1.07 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 13 | 1.07 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 13 | 1.07 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 13 | 1.07 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 13 | 1.07 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 13 | 1.07 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 13 | 1.07 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 13 | 1.07 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 13 | 1.07 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 13 | 1.07 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 2 | 1.07 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 2 | 1.07 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 2 | 1.07 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 1.07 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 1.07 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 1.07 |
| (1,957) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:171:ASN:HD21 | 11 | 1.06 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 20 | 1.06 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 20 | 1.06 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 20 | 1.06 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 2 | 1.06 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 2 | 1.06 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 2 | 1.06 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 3 | 1.06 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 3 | 1.06 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 3 | 1.06 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 4 | 1.06 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 4 | 1.06 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 4 | 1.06 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 6 | 1.06 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 6 | 1.06 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 6 | 1.06 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:184:ALA:H | 17 | 1.06 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:184:ALA:H | 17 | 1.06 |
| (1,46) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:184:ALA:H | 17 | 1.06 |
| (1,445) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:124:LEU:HD11 | 9 | 1.06 |
| (1,445) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:124:LEU:HD12 | 9 | 1.06 |
| (1,445) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:124:LEU:HD13 | 9 | 1.06 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 4 | 1.06 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 5 | 1.06 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG21 | 9 | 1.06 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG22 | 9 | 1.06 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG23 | 9 | 1.06 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 1 | 1.06 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 5 | 1.06 |
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 9 | 1.06 |
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 11 | 1.06 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 20 | 1.06 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 13 | 1.06 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 13 | 1.06 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 13 | 1.06 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 20 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 1.06 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 1.06 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 1.06 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD21 | 18 | 1.06 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD22 | 18 | 1.06 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD23 | 18 | 1.06 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD21 | 18 | 1.06 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD22 | 18 | 1.06 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD23 | 18 | 1.06 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD21 | 18 | 1.06 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD22 | 18 | 1.06 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD23 | 18 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 7 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 7 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 7 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 7 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 7 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 7 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 7 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 7 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 7 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 14 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 14 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 14 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 14 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 14 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 14 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 14 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 14 | 1.06 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 14 | 1.06 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:134:GLN:HE22 | 16 | 1.06 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:134:GLN:HE22 | 16 | 1.06 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:134:GLN:HE22 | 16 | 1.06 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 17 | 1.06 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG21 | 8 | 1.06 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG22 | 8 | 1.06 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG23 | 8 | 1.06 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG21 | 8 | 1.06 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG22 | 8 | 1.06 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG23 | 8 | 1.06 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG21 | 8 | 1.06 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG22 | 8 | 1.06 |
| (1,1932) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG23 | 8 | 1.06 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 1.06 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 1.06 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 1.06 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 8 | 1.06 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 8 | 1.06 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 8 | 1.06 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:149:ASN:HA | 2 | 1.06 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:149:ASN:HA | 2 | 1.06 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:149:ASN:HA | 2 | 1.06 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG11 | 11 | 1.06 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG12 | 11 | 1.06 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG13 | 11 | 1.06 |
| (1,1588) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:119:SER:HA | 20 | 1.06 |
| (1,1588) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:119:SER:HA | 20 | 1.06 |
| (1,1588) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:119:SER:HA | 20 | 1.06 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 17 | 1.06 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 17 | 1.06 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 17 | 1.06 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE22 | 19 | 1.06 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE22 | 19 | 1.06 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE22 | 19 | 1.06 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:H | 1 | 1.06 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:H | 1 | 1.06 |
| (1,1374) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:H | 1 | 1.06 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 13 | 1.06 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 13 | 1.06 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 13 | 1.06 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HA | 2 | 1.06 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HA | 2 | 1.06 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HA | 2 | 1.06 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 12 | 1.06 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 12 | 1.06 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 12 | 1.06 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 12 | 1.06 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 12 | 1.06 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 12 | 1.06 |
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 8 | 1.05 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 12 | 1.05 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 13 | 1.05 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 1 | 1.05 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 1 | 1.05 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 1 | 1.05 |
| (1,396) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:135:ALA:H | 11 | 1.05 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE1 | 17 | 1.05 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE2 | 17 | 1.05 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE1 | 17 | 1.05 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE2 | 17 | 1.05 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE1 | 17 | 1.05 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE2 | 17 | 1.05 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 13 | 1.05 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 15 | 1.05 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 1 | 1.05 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 19 | 1.05 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 6 | 1.05 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 6 | 1.05 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 6 | 1.05 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 15 | 1.05 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 15 | 1.05 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 15 | 1.05 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB3 | 15 | 1.05 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB3 | 15 | 1.05 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB3 | 15 | 1.05 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HB | 18 | 1.05 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HB | 18 | 1.05 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HB | 18 | 1.05 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 13 | 1.05 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 13 | 1.05 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 13 | 1.05 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 15 | 1.05 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 15 | 1.05 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 15 | 1.05 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG21 | 6 | 1.05 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG22 | 6 | 1.05 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG23 | 6 | 1.05 |
| (1,2165) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HA | 2 | 1.05 |
| (1,2165) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HA | 11 | 1.05 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 5 | 1.05 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 9 | 1.05 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 12 | 1.05 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HA | 16 | 1.05 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HA | 16 | 1.05 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HA | 16 | 1.05 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG11 | 4 | 1.05 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG12 | 4 | 1.05 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG13 | 4 | 1.05 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 18 | 1.05 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 18 | 1.05 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 18 | 1.05 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 9 | 1.05 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 9 | 1.05 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 9 | 1.05 |
| (1,1826) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:90:SER:HB2 | 8 | 1.05 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 1 | 1.05 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 1 | 1.05 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 1 | 1.05 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 6 | 1.05 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 6 | 1.05 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 6 | 1.05 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 10 | 1.05 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 10 | 1.05 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 10 | 1.05 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 20 | 1.05 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 20 | 1.05 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 20 | 1.05 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 13 | 1.05 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 13 | 1.05 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 13 | 1.05 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:H | 15 | 1.05 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:H | 15 | 1.05 |
| (1,1698) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:H | 15 | 1.05 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 16 | 1.05 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 16 | 1.05 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 16 | 1.05 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 16 | 1.05 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 16 | 1.05 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 16 | 1.05 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:H | 13 | 1.05 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:H | 13 | 1.05 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:H | 13 | 1.05 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 2 | 1.04 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 2 | 1.04 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 2 | 1.04 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 8 | 1.04 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 8 | 1.04 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 8 | 1.04 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 18 | 1.04 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 18 | 1.04 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 18 | 1.04 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 13 | 1.04 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 13 | 1.04 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 13 | 1.04 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 15 | 1.04 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 15 | 1.04 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 15 | 1.04 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 18 | 1.04 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 18 | 1.04 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 18 | 1.04 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 18 | 1.04 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 18 | 1.04 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 18 | 1.04 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE1 | 15 | 1.04 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE2 | 15 | 1.04 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE1 | 15 | 1.04 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE2 | 15 | 1.04 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE1 | 15 | 1.04 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE2 | 15 | 1.04 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HE1 | 20 | 1.04 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HE2 | 20 | 1.04 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HE1 | 20 | 1.04 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HE2 | 20 | 1.04 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HE1 | 20 | 1.04 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HE2 | 20 | 1.04 |
| (1,3633) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:33:GLN:HB3 | 14 | 1.04 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 2 | 1.04 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG21 | 11 | 1.04 |
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG22 | 11 | 1.04 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3500) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:52:VAL:HG23 | 11 | 1.04 |
| (1,3490) | 1:A:106:ARG:HB3 | 1:A:107:THR:HA | 10 | 1.04 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 2 | 1.04 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 2 | 1.04 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 2 | 1.04 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG11 | 2 | 1.04 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG12 | 2 | 1.04 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG13 | 2 | 1.04 |
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 11 | 1.04 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB1 | 7 | 1.04 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB2 | 7 | 1.04 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB3 | 7 | 1.04 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB1 | 12 | 1.04 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB2 | 12 | 1.04 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB3 | 12 | 1.04 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 3 | 1.04 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 3 | 1.04 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 3 | 1.04 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 19 | 1.04 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 19 | 1.04 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 19 | 1.04 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 1.04 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 1.04 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 1.04 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 1.04 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 1.04 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 1.04 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 1.04 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 1.04 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 1.04 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 1.04 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 1.04 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 1.04 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 1.04 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 1.04 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 1.04 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 1.04 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 1.04 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 1.04 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB1 | 3 | 1.04 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB2 | 3 | 1.04 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB3 | 3 | 1.04 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 18 | 1.04 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 18 | 1.04 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 18 | 1.04 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 10 | 1.04 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 10 | 1.04 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 10 | 1.04 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 19 | 1.04 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 19 | 1.04 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 19 | 1.04 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 19 | 1.04 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 19 | 1.04 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 19 | 1.04 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 19 | 1.04 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 19 | 1.04 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 19 | 1.04 |
| (1,2165) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HA | 19 | 1.04 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 1.04 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 1.04 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 1.04 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 6 | 1.04 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 19 | 1.04 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 12 | 1.04 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 12 | 1.04 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 12 | 1.04 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 1.04 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 1.04 |
| (1,1821) | 1:A:180:GLU:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 1.04 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 6 | 1.04 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 6 | 1.04 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 6 | 1.04 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 9 | 1.04 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 9 | 1.04 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 9 | 1.04 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB2 | 5 | 1.04 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:154:PHE:HB3 | 5 | 1.04 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB2 | 5 | 1.04 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:154:PHE:HB3 | 5 | 1.04 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB2 | 5 | 1.04 |
| (1,1663) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:154:PHE:HB3 | 5 | 1.04 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HZ | 17 | 1.04 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HZ | 17 | 1.04 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HZ | 17 | 1.04 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:150:ALA:H | 19 | 1.04 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:150:ALA:H | 19 | 1.04 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:150:ALA:H | 19 | 1.04 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:HA | 2 | 1.04 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:HA | 2 | 1.04 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:HA | 2 | 1.04 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:HA | 15 | 1.04 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:HA | 15 | 1.04 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:HA | 15 | 1.04 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 8 | 1.04 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 15 | 1.03 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 15 | 1.03 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 15 | 1.03 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 9 | 1.03 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE1 | 2 | 1.03 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE2 | 2 | 1.03 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE1 | 2 | 1.03 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE2 | 2 | 1.03 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE1 | 2 | 1.03 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE2 | 2 | 1.03 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 1 | 1.03 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 1 | 1.03 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 1 | 1.03 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 1 | 1.03 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 1 | 1.03 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG11 | 1 | 1.03 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG12 | 1 | 1.03 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG13 | 1 | 1.03 |
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 17 | 1.03 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 5 | 1.03 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 10 | 1.03 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 10 | 1.03 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 10 | 1.03 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB1 | 10 | 1.03 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB2 | 10 | 1.03 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB3 | 10 | 1.03 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB1 | 17 | 1.03 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB2 | 17 | 1.03 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB3 | 17 | 1.03 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 4 | 1.03 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 4 | 1.03 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 4 | 1.03 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 4 | 1.03 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 4 | 1.03 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 4 | 1.03 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 4 | 1.03 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 4 | 1.03 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 4 | 1.03 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:H | 6 | 1.03 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:H | 6 | 1.03 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:H | 6 | 1.03 |
| (1,2165) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HA | 5 | 1.03 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 1 | 1.03 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 1 | 1.03 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 1 | 1.03 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 4 | 1.03 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 4 | 1.03 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 4 | 1.03 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 20 | 1.03 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 20 | 1.03 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 20 | 1.03 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 20 | 1.03 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 20 | 1.03 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 20 | 1.03 |
| (1,1720) | 1:A:24:ASP:HA | 1:A:59:ASN:HB2 | 19 | 1.03 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 18 | 1.03 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 18 | 1.03 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 18 | 1.03 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 15 | 1.03 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 15 | 1.03 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 15 | 1.03 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 15 | 1.03 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 15 | 1.03 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 15 | 1.03 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 18 | 1.03 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 18 | 1.03 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 18 | 1.03 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB1 | 13 | 1.03 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB2 | 13 | 1.03 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB3 | 13 | 1.03 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB1 | 13 | 1.03 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB2 | 13 | 1.03 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB3 | 13 | 1.03 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB1 | 13 | 1.03 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB2 | 13 | 1.03 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB3 | 13 | 1.03 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:HA | 10 | 1.03 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:HA | 10 | 1.03 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:HA | 10 | 1.03 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 19 | 1.03 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 19 | 1.03 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 19 | 1.03 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 19 | 1.03 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 19 | 1.03 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 19 | 1.03 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 5 | 1.02 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 5 | 1.02 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 5 | 1.02 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 9 | 1.02 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 9 | 1.02 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 9 | 1.02 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 9 | 1.02 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 9 | 1.02 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 9 | 1.02 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 5 | 1.02 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 5 | 1.02 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 5 | 1.02 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 3 | 1.02 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 3 | 1.02 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 3 | 1.02 |
| (1,3505) | 1:A:106:ARG:HB2 | 1:A:132:PRO:HG2 | 9 | 1.02 |
| (1,3505) | 1:A:106:ARG:HB2 | 1:A:132:PRO:HG3 | 9 | 1.02 |
| (1,331) | 1:A:150:ALA:H | 1:A:178:LYS:HE3 | 20 | 1.02 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HB | 15 | 1.02 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HB | 15 | 1.02 |
| (1,3185) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HB | 15 | 1.02 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 8 | 1.02 |
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 10 | 1.02 |
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 19 | 1.02 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 15 | 1.02 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 15 | 1.02 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 15 | 1.02 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 1.02 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 1.02 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 1.02 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 1.02 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 1.02 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 1.02 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 1.02 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 1.02 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 1.02 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG11 | 3 | 1.02 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG12 | 3 | 1.02 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG13 | 3 | 1.02 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG11 | 3 | 1.02 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG12 | 3 | 1.02 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG13 | 3 | 1.02 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 3 | 1.02 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 3 | 1.02 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG13 | 3 | 1.02 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 19 | 1.02 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 19 | 1.02 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 19 | 1.02 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 15 | 1.02 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 15 | 1.02 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 15 | 1.02 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 15 | 1.02 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 15 | 1.02 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 15 | 1.02 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 15 | 1.02 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 15 | 1.02 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 15 | 1.02 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 18 | 1.02 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 18 | 1.02 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 18 | 1.02 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 18 | 1.02 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 18 | 1.02 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 18 | 1.02 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 18 | 1.02 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 18 | 1.02 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 18 | 1.02 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:H | 15 | 1.02 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:H | 15 | 1.02 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:H | 15 | 1.02 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 1.02 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 1.02 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 1.02 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 1 | 1.02 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG11 | 7 | 1.02 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG12 | 7 | 1.02 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG13 | 7 | 1.02 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG11 | 7 | 1.02 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG12 | 7 | 1.02 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG13 | 7 | 1.02 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG11 | 7 | 1.02 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG12 | 7 | 1.02 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG13 | 7 | 1.02 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HA | 6 | 1.02 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HA | 6 | 1.02 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HA | 6 | 1.02 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 11 | 1.02 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 11 | 1.02 |
| (1,1921) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 11 | 1.02 |
| (1,1826) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:90:SER:HB2 | 2 | 1.02 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 7 | 1.02 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 7 | 1.02 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 7 | 1.02 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 19 | 1.02 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 19 | 1.02 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 19 | 1.02 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 7 | 1.02 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 7 | 1.02 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 7 | 1.02 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 11 | 1.02 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 11 | 1.02 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 11 | 1.02 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 15 | 1.02 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 15 | 1.02 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 15 | 1.02 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB1 | 7 | 1.02 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB2 | 7 | 1.02 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB3 | 7 | 1.02 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB1 | 7 | 1.02 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB2 | 7 | 1.02 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB3 | 7 | 1.02 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB1 | 7 | 1.02 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB2 | 7 | 1.02 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB3 | 7 | 1.02 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:HA | 5 | 1.02 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:HA | 5 | 1.02 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:HA | 5 | 1.02 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HA | 12 | 1.02 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HA | 12 | 1.02 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HA | 12 | 1.02 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 4 | 1.02 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 9 | 1.01 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 9 | 1.01 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 9 | 1.01 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 18 | 1.01 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 19 | 1.01 |
| (1,495) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:15:GLU:H | 12 | 1.01 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 2 | 1.01 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE1 | 5 | 1.01 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE2 | 5 | 1.01 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE1 | 5 | 1.01 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE2 | 5 | 1.01 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE1 | 5 | 1.01 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE2 | 5 | 1.01 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 5 | 1.01 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 5 | 1.01 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 5 | 1.01 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 5 | 1.01 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 5 | 1.01 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 5 | 1.01 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 4 | 1.01 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 9 | 1.01 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 9 | 1.01 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 9 | 1.01 |
| (1,3490) | 1:A:106:ARG:HB3 | 1:A:107:THR:HA | 11 | 1.01 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 17 | 1.01 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 17 | 1.01 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 17 | 1.01 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 16 | 1.01 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 16 | 1.01 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 16 | 1.01 |
| (1,2165) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HA | 4 | 1.01 |
| (1,2165) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HA | 7 | 1.01 |
| (1,2165) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HA | 8 | 1.01 |
| (1,2165) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HA | 9 | 1.01 |
| (1,2165) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HA | 17 | 1.01 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 18 | 1.01 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 5 | 1.01 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 5 | 1.01 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 5 | 1.01 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 17 | 1.01 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 17 | 1.01 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 17 | 1.01 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 15 | 1.01 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 15 | 1.01 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 15 | 1.01 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 16 | 1.01 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 16 | 1.01 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 16 | 1.01 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:173:GLY:HA2 | 12 | 1.01 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:173:GLY:HA2 | 12 | 1.01 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:173:GLY:HA2 | 12 | 1.01 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 12 | 1.01 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 12 | 1.01 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 12 | 1.01 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 12 | 1.01 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 12 | 1.01 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 12 | 1.01 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 18 | 1.01 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 18 | 1.01 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 18 | 1.01 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG21 | 3 | 1.01 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG22 | 3 | 1.01 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG23 | 3 | 1.01 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 17 | 1.01 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 17 | 1.01 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 17 | 1.01 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 19 | 1.01 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 19 | 1.01 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 19 | 1.01 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 5 | 1.01 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 5 | 1.01 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 5 | 1.01 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB2 | 2 | 1.01 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB2 | 2 | 1.01 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB2 | 2 | 1.01 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 15 | 1.0 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG11 | 17 | 1.0 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG12 | 17 | 1.0 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG13 | 17 | 1.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 6 | 1.0 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 7 | 1.0 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 19 | 1.0 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 19 | 1.0 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 19 | 1.0 |
| (1,3512) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:120:SER:HB3 | 16 | 1.0 |
| (1,3512) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:120:SER:HB3 | 16 | 1.0 |
| (1,3512) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:120:SER:HB3 | 16 | 1.0 |
| (1,3490) | 1:A:106:ARG:HB3 | 1:A:107:THR:HA | 3 | 1.0 |
| (1,3490) | 1:A:106:ARG:HB3 | 1:A:107:THR:HA | 16 | 1.0 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 9 | 1.0 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 9 | 1.0 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 9 | 1.0 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG11 | 9 | 1.0 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG12 | 9 | 1.0 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG13 | 9 | 1.0 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 3 | 1.0 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 3 | 1.0 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 3 | 1.0 |
| (1,331) | 1:A:150:ALA:H | 1:A:178:LYS:HE3 | 11 | 1.0 |
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 6 | 1.0 |
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 20 | 1.0 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:H | 10 | 1.0 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:H | 10 | 1.0 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:H | 10 | 1.0 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:H | 20 | 1.0 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:H | 20 | 1.0 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:H | 20 | 1.0 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 2 | 1.0 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 13 | 1.0 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 13 | 1.0 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 13 | 1.0 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 13 | 1.0 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 13 | 1.0 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 13 | 1.0 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 14 | 1.0 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 14 | 1.0 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 14 | 1.0 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG21 | 17 | 1.0 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG22 | 17 | 1.0 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG23 | 17 | 1.0 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 14 | 1.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 1.0 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 1.0 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 1.0 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 1.0 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 1.0 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 1.0 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 1.0 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 1.0 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 1.0 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 3 | 1.0 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 3 | 1.0 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 3 | 1.0 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 3 | 1.0 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 3 | 1.0 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 3 | 1.0 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 3 | 1.0 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 3 | 1.0 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 3 | 1.0 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 3 | 1.0 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 3 | 1.0 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 3 | 1.0 |
| (1,2165) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HA | 16 | 1.0 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG11 | 4 | 1.0 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG12 | 4 | 1.0 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG13 | 4 | 1.0 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 1 | 1.0 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 1 | 1.0 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 1 | 1.0 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG21 | 8 | 1.0 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG22 | 8 | 1.0 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG23 | 8 | 1.0 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG21 | 13 | 1.0 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG22 | 13 | 1.0 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG23 | 13 | 1.0 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 16 | 1.0 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 16 | 1.0 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 16 | 1.0 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:H | 4 | 1.0 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:H | 4 | 1.0 |
| (1,1708) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:H | 4 | 1.0 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:28:VAL:H | 15 | 1.0 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:28:VAL:H | 15 | 1.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:28:VAL:H | 15 | 1.0 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HZ | 11 | 1.0 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HZ | 11 | 1.0 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HZ | 11 | 1.0 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG11 | 18 | 1.0 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG12 | 18 | 1.0 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG13 | 18 | 1.0 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:HA | 17 | 1.0 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:HA | 17 | 1.0 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:HA | 17 | 1.0 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 16 | 1.0 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 16 | 1.0 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 16 | 1.0 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 16 | 1.0 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 16 | 1.0 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 16 | 1.0 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 16 | 1.0 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 16 | 1.0 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 16 | 1.0 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HA | 1 | 1.0 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HA | 1 | 1.0 |
| (1,1380) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HA | 1 | 1.0 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 15 | 1.0 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 15 | 1.0 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 15 | 1.0 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 16 | 1.0 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 16 | 1.0 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 16 | 1.0 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 9 | 1.0 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 9 | 1.0 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 9 | 1.0 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 5 | 1.0 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 5 | 1.0 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 5 | 1.0 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG11 | 15 | 0.99 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG12 | 15 | 0.99 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG13 | 15 | 0.99 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 11 | 0.99 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 16 | 0.99 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 0.99 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 0.99 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 0.99 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 0.99 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 0.99 |
| (1,3988) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 0.99 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 13 | 0.99 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 13 | 0.99 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 13 | 0.99 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 13 | 0.99 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 13 | 0.99 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 13 | 0.99 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE3 | 2 | 0.99 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE3 | 2 | 0.99 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE3 | 2 | 0.99 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 15 | 0.99 |
| (1,3512) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:120:SER:HB3 | 18 | 0.99 |
| (1,3512) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:120:SER:HB3 | 18 | 0.99 |
| (1,3512) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:120:SER:HB3 | 18 | 0.99 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 3 | 0.99 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 3 | 0.99 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 3 | 0.99 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG11 | 3 | 0.99 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG12 | 3 | 0.99 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG13 | 3 | 0.99 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 18 | 0.99 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 18 | 0.99 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 18 | 0.99 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 8 | 0.99 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 8 | 0.99 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 8 | 0.99 |
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 1 | 0.99 |
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 13 | 0.99 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:H | 14 | 0.99 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:H | 14 | 0.99 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:H | 14 | 0.99 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 3 | 0.99 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE2 | 8 | 0.99 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE2 | 8 | 0.99 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE2 | 8 | 0.99 |
| (1,2846) | 1:A:54:PHE:HA | 1:A:55:ASN:HB3 | 3 | 0.99 |
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 10 | 0.99 |
| (1,2677) | 1:A:28:VAL:HB | 1:A:173:GLY:HA2 | 6 | 0.99 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 12 | 0.99 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 12 | 0.99 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 12 | 0.99 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG21 | 16 | 0.99 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG22 | 16 | 0.99 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG23 | 16 | 0.99 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 16 | 0.99 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 16 | 0.99 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 16 | 0.99 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 16 | 0.99 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 16 | 0.99 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 16 | 0.99 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 16 | 0.99 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 16 | 0.99 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 16 | 0.99 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 3 | 0.99 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 3 | 0.99 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 3 | 0.99 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG11 | 5 | 0.99 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG12 | 5 | 0.99 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG13 | 5 | 0.99 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 2 | 0.99 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 2 | 0.99 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 2 | 0.99 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 18 | 0.99 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 18 | 0.99 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 18 | 0.99 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 16 | 0.99 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 16 | 0.99 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 16 | 0.99 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 16 | 0.99 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 16 | 0.99 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 16 | 0.99 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG21 | 1 | 0.99 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG22 | 1 | 0.99 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG23 | 1 | 0.99 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:72:ALA:H | 8 | 0.99 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:72:ALA:H | 8 | 0.99 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:72:ALA:H | 8 | 0.99 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 4 | 0.99 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 4 | 0.99 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 4 | 0.99 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG11 | 10 | 0.99 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG12 | 10 | 0.99 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG13 | 10 | 0.99 |
| (1,158) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:113:LEU:H | 5 | 0.99 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:HA | 8 | 0.99 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:HA | 8 | 0.99 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:HA | 8 | 0.99 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG2 | 7 | 0.99 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG3 | 7 | 0.99 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG2 | 7 | 0.99 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG3 | 7 | 0.99 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 7 | 0.99 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 7 | 0.99 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 12 | 0.99 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 12 | 0.99 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 12 | 0.99 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 12 | 0.99 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 12 | 0.99 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 12 | 0.99 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 12 | 0.99 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 12 | 0.99 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 12 | 0.99 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 7 | 0.99 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 7 | 0.99 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 7 | 0.99 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 20 | 0.99 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 20 | 0.99 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 20 | 0.99 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 13 | 0.98 |
| (1,495) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:15:GLU:H | 5 | 0.98 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 19 | 0.98 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 19 | 0.98 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 19 | 0.98 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 19 | 0.98 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 19 | 0.98 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 19 | 0.98 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE1 | 4 | 0.98 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE2 | 4 | 0.98 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE1 | 4 | 0.98 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE2 | 4 | 0.98 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE1 | 4 | 0.98 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE2 | 4 | 0.98 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 14 | 0.98 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 14 | 0.98 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 14 | 0.98 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 14 | 0.98 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 14 | 0.98 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 14 | 0.98 |
| (1,3775) | 1:A:106:ARG:HG3 | 1:A:120:SER:HB2 | 4 | 0.98 |
| (1,3513) | 1:A:106:ARG:HG3 | 1:A:120:SER:HB3 | 16 | 0.98 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG21 | 6 | 0.98 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG22 | 6 | 0.98 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG23 | 6 | 0.98 |
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 18 | 0.98 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 3 | 0.98 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 4 | 0.98 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB1 | 16 | 0.98 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB2 | 16 | 0.98 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB3 | 16 | 0.98 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG11 | 19 | 0.98 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG12 | 19 | 0.98 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HG13 | 19 | 0.98 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG11 | 19 | 0.98 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG12 | 19 | 0.98 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HG13 | 19 | 0.98 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG11 | 19 | 0.98 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG12 | 19 | 0.98 |
| (1,2310) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HG13 | 19 | 0.98 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 20 | 0.98 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 20 | 0.98 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 20 | 0.98 |
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 4 | 0.98 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 4 | 0.98 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 4 | 0.98 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 4 | 0.98 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 14 | 0.98 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 14 | 0.98 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 14 | 0.98 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG11 | 6 | 0.98 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG12 | 6 | 0.98 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG13 | 6 | 0.98 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 12 | 0.98 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 12 | 0.98 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 12 | 0.98 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 5 | 0.98 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 5 | 0.98 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 5 | 0.98 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG11 | 8 | 0.98 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG12 | 8 | 0.98 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG13 | 8 | 0.98 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG11 | 19 | 0.98 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG12 | 19 | 0.98 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG13 | 19 | 0.98 |
| (1,1585) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:112:THR:H | 19 | 0.98 |
| (1,1585) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:112:THR:H | 19 | 0.98 |
| (1,1585) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:112:THR:H | 19 | 0.98 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 10 | 0.98 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 10 | 0.98 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 10 | 0.98 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 4 | 0.98 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 4 | 0.98 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 4 | 0.98 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 14 | 0.98 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 14 | 0.98 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 14 | 0.98 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 9 | 0.98 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 9 | 0.98 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 9 | 0.98 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 9 | 0.98 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 9 | 0.98 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 9 | 0.98 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 9 | 0.98 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 9 | 0.98 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 9 | 0.98 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 14 | 0.98 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 14 | 0.98 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 14 | 0.98 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 14 | 0.98 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 14 | 0.98 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 14 | 0.98 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 14 | 0.98 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 14 | 0.98 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 14 | 0.98 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 7 | 0.98 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 7 | 0.98 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 7 | 0.98 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 7 | 0.98 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 7 | 0.98 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 7 | 0.98 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 7 | 0.98 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 7 | 0.98 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 7 | 0.98 |
| (1,1323) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:118:PHE:HA | 18 | 0.98 |
| (1,1323) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:118:PHE:HA | 18 | 0.98 |
| (1,1323) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:118:PHE:HA | 18 | 0.98 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HA | 6 | 0.98 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HA | 6 | 0.98 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HA | 6 | 0.98 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 17 | 0.98 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 17 | 0.98 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 17 | 0.98 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 4 | 0.98 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 4 | 0.98 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 4 | 0.98 |
| (1,1156) | 1:A:67:SER:H | 1:A:124:LEU:HD11 | 15 | 0.98 |
| (1,1156) | 1:A:67:SER:H | 1:A:124:LEU:HD12 | 15 | 0.98 |
| (1,1156) | 1:A:67:SER:H | 1:A:124:LEU:HD13 | 15 | 0.98 |
| (1,1156) | 1:A:67:SER:H | 1:A:124:LEU:HD11 | 18 | 0.98 |
| (1,1156) | 1:A:67:SER:H | 1:A:124:LEU:HD12 | 18 | 0.98 |
| (1,1156) | 1:A:67:SER:H | 1:A:124:LEU:HD13 | 18 | 0.98 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 10 | 0.97 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 18 | 0.97 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 18 | 0.97 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 18 | 0.97 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 3 | 0.97 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 3 | 0.97 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 3 | 0.97 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG21 | 15 | 0.97 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG22 | 15 | 0.97 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG23 | 15 | 0.97 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 7 | 0.97 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 7 | 0.97 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 7 | 0.97 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE1 | 19 | 0.97 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE2 | 19 | 0.97 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE1 | 19 | 0.97 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE2 | 19 | 0.97 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE1 | 19 | 0.97 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE2 | 19 | 0.97 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 7 | 0.97 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 7 | 0.97 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 1 | 0.97 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 1 | 0.97 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 1 | 0.97 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 17 | 0.97 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 17 | 0.97 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 17 | 0.97 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 8 | 0.97 |
| (1,3388) | 1:A:95:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 17 | 0.97 |
| (1,3388) | 1:A:95:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 17 | 0.97 |
| (1,3388) | 1:A:95:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 17 | 0.97 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 11 | 0.97 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 11 | 0.97 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 11 | 0.97 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 0.97 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 0.97 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 0.97 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HB | 20 | 0.97 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HB | 20 | 0.97 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HB | 20 | 0.97 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG21 | 2 | 0.97 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG22 | 2 | 0.97 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG23 | 2 | 0.97 |
| (1,2576) | 1:A:59:ASN:HA | 1:A:129:ASN:HD21 | 8 | 0.97 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 0.97 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 0.97 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 0.97 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 0.97 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 0.97 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 0.97 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 0.97 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 0.97 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 0.97 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:HA | 5 | 0.97 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:HA | 5 | 0.97 |
| (1,2192) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:HA | 5 | 0.97 |
| (1,2165) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HA | 1 | 0.97 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 0.97 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 0.97 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 0.97 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG21 | 3 | 0.97 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG22 | 3 | 0.97 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG23 | 3 | 0.97 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG21 | 3 | 0.97 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG22 | 3 | 0.97 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG23 | 3 | 0.97 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG21 | 3 | 0.97 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG22 | 3 | 0.97 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG23 | 3 | 0.97 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:59:ASN:HB3 | 15 | 0.97 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:59:ASN:HB3 | 15 | 0.97 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:59:ASN:HB3 | 15 | 0.97 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 14 | 0.97 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 14 | 0.97 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 14 | 0.97 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 14 | 0.97 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 14 | 0.97 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 14 | 0.97 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 14 | 0.97 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 14 | 0.97 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 14 | 0.97 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:ASN:H | 2 | 0.97 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:ASN:H | 2 | 0.97 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:ASN:H | 2 | 0.97 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 18 | 0.97 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 18 | 0.97 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 18 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 14 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 14 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 14 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 14 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 14 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 14 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 14 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 14 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 14 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 19 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 19 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 19 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 19 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 19 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 19 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 19 | 0.97 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 19 | 0.97 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 19 | 0.97 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 20 | 0.97 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 20 | 0.97 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 20 | 0.97 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 5 | 0.97 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 5 | 0.97 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 5 | 0.97 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 5 | 0.97 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 5 | 0.97 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 5 | 0.97 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 5 | 0.97 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 5 | 0.97 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 5 | 0.97 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 4 | 0.97 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 4 | 0.97 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 4 | 0.97 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 4 | 0.97 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 4 | 0.97 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 4 | 0.97 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 4 | 0.97 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 4 | 0.97 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 4 | 0.97 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HD21 | 13 | 0.96 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HD21 | 13 | 0.96 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HD21 | 13 | 0.96 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 11 | 0.96 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 11 | 0.96 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 11 | 0.96 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 1 | 0.96 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 1 | 0.96 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 1 | 0.96 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 5 | 0.96 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 5 | 0.96 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 5 | 0.96 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 9 | 0.96 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 9 | 0.96 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 9 | 0.96 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 11 | 0.96 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 11 | 0.96 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 11 | 0.96 |
| (1,3323) | 1:A:119:SER:HB3 | 1:A:120:SER:HB2 | 11 | 0.96 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG2 | 15 | 0.96 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG3 | 15 | 0.96 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 11 | 0.96 |
| (1,3072) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:130:THR:HB | 3 | 0.96 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 10 | 0.96 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 5 | 0.96 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 5 | 0.96 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 5 | 0.96 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB1 | 8 | 0.96 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB2 | 8 | 0.96 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB3 | 8 | 0.96 |
| (1,2165) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HA | 13 | 0.96 |
| (1,2165) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HA | 20 | 0.96 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 4 | 0.96 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 12 | 0.96 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 14 | 0.96 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 14 | 0.96 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 14 | 0.96 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 12 | 0.96 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 12 | 0.96 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 12 | 0.96 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 17 | 0.96 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 17 | 0.96 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 17 | 0.96 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB3 | 5 | 0.96 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB3 | 5 | 0.96 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB3 | 5 | 0.96 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG11 | 5 | 0.96 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG12 | 5 | 0.96 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG13 | 5 | 0.96 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 20 | 0.96 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 20 | 0.96 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 20 | 0.96 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB1 | 15 | 0.96 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB2 | 15 | 0.96 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB3 | 15 | 0.96 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB1 | 15 | 0.96 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB2 | 15 | 0.96 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB3 | 15 | 0.96 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB1 | 15 | 0.96 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB2 | 15 | 0.96 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB3 | 15 | 0.96 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 3 | 0.96 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 3 | 0.96 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 3 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 6 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 6 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 6 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 6 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 6 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 6 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 6 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 6 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 6 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 8 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 8 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 8 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 8 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 8 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 8 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 8 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 8 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 8 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 13 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 13 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 13 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 13 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 13 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 13 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 13 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 13 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 13 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 17 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 17 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 17 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 17 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 17 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 17 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 17 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 17 | 0.96 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 17 | 0.96 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 7 | 0.96 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 7 | 0.96 |
| (1,1362) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 7 | 0.96 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 15 | 0.96 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 15 | 0.96 |
| (1,1251) | 1:A:26:GLY:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 15 | 0.96 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 10 | 0.96 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 1 | 0.95 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 16 | 0.95 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 20 | 0.95 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 20 | 0.95 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 20 | 0.95 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 20 | 0.95 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:57:GLN:H | 15 | 0.95 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:57:GLN:H | 15 | 0.95 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:57:GLN:H | 15 | 0.95 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG21 | 10 | 0.95 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG22 | 10 | 0.95 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG23 | 10 | 0.95 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 1 | 0.95 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 1 | 0.95 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 1 | 0.95 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 1 | 0.95 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 1 | 0.95 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 1 | 0.95 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 7 | 0.95 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 7 | 0.95 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 7 | 0.95 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 7 | 0.95 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 7 | 0.95 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 7 | 0.95 |
| (1,3490) | 1:A:106:ARG:HB3 | 1:A:107:THR:HA | 9 | 0.95 |
| (1,3490) | 1:A:106:ARG:HB3 | 1:A:107:THR:HA | 15 | 0.95 |
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 1 | 0.95 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 12 | 0.95 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 17 | 0.95 |
| (1,3024) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:159:GLN:HB3 | 11 | 0.95 |
| (1,3024) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:159:GLN:HB3 | 19 | 0.95 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 9 | 0.95 |
| (1,2899) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:121:GLU:HG2 | 17 | 0.95 |
| (1,2899) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:121:GLU:HG2 | 17 | 0.95 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 7 | 0.95 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 7 | 0.95 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 7 | 0.95 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 7 | 0.95 |
| (1,2165) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HA | 3 | 0.95 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 16 | 0.95 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 15 | 0.95 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 15 | 0.95 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 15 | 0.95 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG21 | 18 | 0.95 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG22 | 18 | 0.95 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG23 | 18 | 0.95 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG21 | 18 | 0.95 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG22 | 18 | 0.95 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG23 | 18 | 0.95 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG21 | 18 | 0.95 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG22 | 18 | 0.95 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG23 | 18 | 0.95 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:59:ASN:HB3 | 20 | 0.95 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:59:ASN:HB3 | 20 | 0.95 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:59:ASN:HB3 | 20 | 0.95 |
| (1,1826) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:90:SER:HB2 | 3 | 0.95 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG21 | 12 | 0.95 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG22 | 12 | 0.95 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG23 | 12 | 0.95 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 3 | 0.95 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 3 | 0.95 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 3 | 0.95 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 9 | 0.95 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 9 | 0.95 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 9 | 0.95 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:ASN:H | 16 | 0.95 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:ASN:H | 16 | 0.95 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:ASN:H | 16 | 0.95 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:HA | 4 | 0.95 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:HA | 4 | 0.95 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:HA | 4 | 0.95 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 9 | 0.95 |
| (1,1019) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:138:PHE:HB2 | 4 | 0.95 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 7 | 0.94 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 11 | 0.94 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 4 | 0.94 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 4 | 0.94 |
| (1,526) | 1:A:82:HIS:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 4 | 0.94 |
| (1,495) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:15:GLU:H | 16 | 0.94 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 20 | 0.94 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 20 | 0.94 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 20 | 0.94 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 20 | 0.94 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 20 | 0.94 |
| (1,3490) | 1:A:106:ARG:HB3 | 1:A:107:THR:HA | 13 | 0.94 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 10 | 0.94 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 10 | 0.94 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 10 | 0.94 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 19 | 0.94 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 19 | 0.94 |
| (1,3347) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 19 | 0.94 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 2 | 0.94 |
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 16 | 0.94 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 17 | 0.94 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 17 | 0.94 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 17 | 0.94 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 1 | 0.94 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 5 | 0.94 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 14 | 0.94 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 9 | 0.94 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 9 | 0.94 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 9 | 0.94 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG11 | 9 | 0.94 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG12 | 9 | 0.94 |
| (1,2834) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:182:VAL:HG13 | 9 | 0.94 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:100:GLY:HA3 | 4 | 0.94 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:100:GLY:HA3 | 4 | 0.94 |
| (1,2740) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:100:GLY:HA3 | 4 | 0.94 |
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 19 | 0.94 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 0.94 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 0.94 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 0.94 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HA | 2 | 0.94 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HA | 2 | 0.94 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HA | 2 | 0.94 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HA | 17 | 0.94 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HA | 17 | 0.94 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HA | 17 | 0.94 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG11 | 16 | 0.94 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG12 | 16 | 0.94 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG13 | 16 | 0.94 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG21 | 17 | 0.94 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG22 | 17 | 0.94 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG23 | 17 | 0.94 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 15 | 0.94 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 15 | 0.94 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 15 | 0.94 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 14 | 0.94 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 14 | 0.94 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 14 | 0.94 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:72:ALA:H | 2 | 0.94 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:72:ALA:H | 2 | 0.94 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:72:ALA:H | 2 | 0.94 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG11 | 6 | 0.94 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG12 | 6 | 0.94 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG13 | 6 | 0.94 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG11 | 17 | 0.94 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG12 | 17 | 0.94 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG13 | 17 | 0.94 |
| (1,1588) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:119:SER:HA | 19 | 0.94 |
| (1,1588) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:119:SER:HA | 19 | 0.94 |
| (1,1588) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:119:SER:HA | 19 | 0.94 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB1 | 3 | 0.94 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB2 | 3 | 0.94 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB3 | 3 | 0.94 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB1 | 3 | 0.94 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB2 | 3 | 0.94 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB3 | 3 | 0.94 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB1 | 3 | 0.94 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB2 | 3 | 0.94 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB3 | 3 | 0.94 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:HA | 14 | 0.94 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:HA | 14 | 0.94 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:HA | 14 | 0.94 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:HA3 | 11 | 0.94 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:HA3 | 11 | 0.94 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:HA3 | 11 | 0.94 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 7 | 0.94 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 7 | 0.94 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 7 | 0.94 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:ASN:H | 20 | 0.94 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:ASN:H | 20 | 0.94 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:ASN:H | 20 | 0.94 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 6 | 0.94 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 6 | 0.94 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 6 | 0.94 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 13 | 0.94 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 13 | 0.94 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 13 | 0.94 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 11 | 0.94 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 11 | 0.94 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 11 | 0.94 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 11 | 0.94 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 11 | 0.94 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 11 | 0.94 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 11 | 0.94 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 11 | 0.94 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 11 | 0.94 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:H | 12 | 0.94 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:H | 12 | 0.94 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:H | 12 | 0.94 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 12 | 0.94 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 12 | 0.94 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 12 | 0.94 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 12 | 0.94 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 12 | 0.94 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 12 | 0.94 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 12 | 0.94 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 12 | 0.94 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 12 | 0.94 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 19 | 0.94 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 19 | 0.94 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 19 | 0.94 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB2 | 12 | 0.94 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB2 | 12 | 0.94 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB2 | 12 | 0.94 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 3 | 0.94 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 3 | 0.94 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 3 | 0.94 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 3 | 0.94 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 3 | 0.94 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 3 | 0.94 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 15 | 0.94 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 15 | 0.94 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 15 | 0.94 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 4 | 0.93 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 17 | 0.93 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG21 | 17 | 0.93 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG22 | 17 | 0.93 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG23 | 17 | 0.93 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE3 | 1 | 0.93 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE3 | 1 | 0.93 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE3 | 1 | 0.93 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 12 | 0.93 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 12 | 0.93 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 12 | 0.93 |
| (1,3527) | 1:A:176:HIS:HB2 | 1:A:178:LYS:HE2 | 14 | 0.93 |
| (1,3490) | 1:A:106:ARG:HB3 | 1:A:107:THR:HA | 2 | 0.93 |
| (1,3490) | 1:A:106:ARG:HB3 | 1:A:107:THR:HA | 6 | 0.93 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 7 | 0.93 |
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 6 | 0.93 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 19 | 0.93 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 19 | 0.93 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 19 | 0.93 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 10 | 0.93 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 10 | 0.93 |
| (1,2547) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 10 | 0.93 |
| (1,2514) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:19:ALA:HA | 16 | 0.93 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 0.93 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 0.93 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 0.93 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 0.93 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 0.93 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 0.93 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 0.93 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 0.93 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 0.93 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 11 | 0.93 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 11 | 0.93 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 11 | 0.93 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 15 | 0.93 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 15 | 0.93 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 15 | 0.93 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:173:GLY:HA2 | 13 | 0.93 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:173:GLY:HA2 | 13 | 0.93 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:173:GLY:HA2 | 13 | 0.93 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG21 | 7 | 0.93 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG22 | 7 | 0.93 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG23 | 7 | 0.93 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:59:ASN:H | 17 | 0.93 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:59:ASN:H | 17 | 0.93 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:59:ASN:H | 17 | 0.93 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 14 | 0.93 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 14 | 0.93 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 14 | 0.93 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:72:ALA:H | 10 | 0.93 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:72:ALA:H | 10 | 0.93 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:72:ALA:H | 10 | 0.93 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG11 | 7 | 0.93 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG12 | 7 | 0.93 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG13 | 7 | 0.93 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG11 | 9 | 0.93 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG12 | 9 | 0.93 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG13 | 9 | 0.93 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG21 | 18 | 0.93 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG22 | 18 | 0.93 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG23 | 18 | 0.93 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG21 | 18 | 0.93 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG22 | 18 | 0.93 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG23 | 18 | 0.93 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG21 | 18 | 0.93 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG22 | 18 | 0.93 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG23 | 18 | 0.93 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:HA3 | 4 | 0.93 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:HA3 | 4 | 0.93 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:HA3 | 4 | 0.93 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:HA3 | 6 | 0.93 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:HA3 | 6 | 0.93 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:HA3 | 6 | 0.93 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:HA3 | 13 | 0.93 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:HA3 | 13 | 0.93 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:HA3 | 13 | 0.93 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 1 | 0.93 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 1 | 0.93 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 1 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 1 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 1 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 1 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 1 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 1 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 1 | 0.93 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 1 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 1 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 1 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 4 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 4 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 4 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 4 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 4 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 4 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 4 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 4 | 0.93 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 4 | 0.93 |
| (1,1323) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:118:PHE:HA | 10 | 0.93 |
| (1,1323) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:118:PHE:HA | 10 | 0.93 |
| (1,1323) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:118:PHE:HA | 10 | 0.93 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 10 | 0.93 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 10 | 0.93 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 10 | 0.93 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 18 | 0.93 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 18 | 0.93 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 18 | 0.93 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 14 | 0.92 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 3 | 0.92 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE1 | 9 | 0.92 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HE2 | 9 | 0.92 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE1 | 9 | 0.92 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HE2 | 9 | 0.92 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE1 | 9 | 0.92 |
| (1,3913) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HE2 | 9 | 0.92 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 16 | 0.92 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 16 | 0.92 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 6 | 0.92 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 6 | 0.92 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 6 | 0.92 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 6 | 0.92 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 6 | 0.92 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 6 | 0.92 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 10 | 0.92 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 10 | 0.92 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 10 | 0.92 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 10 | 0.92 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 10 | 0.92 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 10 | 0.92 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 14 | 0.92 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 14 | 0.92 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 14 | 0.92 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 14 | 0.92 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 14 | 0.92 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 14 | 0.92 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 13 | 0.92 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 13 | 0.92 |
| (1,3490) | 1:A:106:ARG:HB3 | 1:A:107:THR:HA | 5 | 0.92 |
| (1,331) | 1:A:150:ALA:H | 1:A:178:LYS:HE3 | 12 | 0.92 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 6 | 0.92 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 17 | 0.92 |
| (1,3024) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:159:GLN:HB3 | 15 | 0.92 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 5 | 0.92 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 5 | 0.92 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 5 | 0.92 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 7 | 0.92 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 7 | 0.92 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 7 | 0.92 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 13 | 0.92 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 13 | 0.92 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 13 | 0.92 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 12 | 0.92 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 7 | 0.92 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 7 | 0.92 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 7 | 0.92 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG21 | 5 | 0.92 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG22 | 5 | 0.92 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG23 | 5 | 0.92 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB1 | 20 | 0.92 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB2 | 20 | 0.92 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB3 | 20 | 0.92 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG11 | 10 | 0.92 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG12 | 10 | 0.92 |
| (1,2068) | 1:A:15:GLU:HA | 1:A:16:VAL:HG13 | 10 | 0.92 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG11 | 3 | 0.92 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG12 | 3 | 0.92 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG13 | 3 | 0.92 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG21 | 6 | 0.92 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG22 | 6 | 0.92 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG23 | 6 | 0.92 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG21 | 6 | 0.92 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG22 | 6 | 0.92 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG23 | 6 | 0.92 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG21 | 6 | 0.92 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG22 | 6 | 0.92 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG23 | 6 | 0.92 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:173:GLY:HA2 | 3 | 0.92 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:173:GLY:HA2 | 3 | 0.92 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:173:GLY:HA2 | 3 | 0.92 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:156:VAL:HG21 | 11 | 0.92 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:156:VAL:HG22 | 11 | 0.92 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:156:VAL:HG23 | 11 | 0.92 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:156:VAL:HG21 | 11 | 0.92 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:156:VAL:HG22 | 11 | 0.92 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:156:VAL:HG23 | 11 | 0.92 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:156:VAL:HG21 | 11 | 0.92 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:156:VAL:HG22 | 11 | 0.92 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:156:VAL:HG23 | 11 | 0.92 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 10 | 0.92 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 10 | 0.92 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 10 | 0.92 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 18 | 0.92 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 18 | 0.92 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 18 | 0.92 |
| (1,1720) | 1:A:24:ASP:HA | 1:A:59:ASN:HB2 | 2 | 0.92 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 20 | 0.92 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 20 | 0.92 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 20 | 0.92 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 18 | 0.92 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 18 | 0.92 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 18 | 0.92 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HZ | 2 | 0.92 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HZ | 2 | 0.92 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HZ | 2 | 0.92 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:149:ASN:HA | 15 | 0.92 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:149:ASN:HA | 15 | 0.92 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:149:ASN:HA | 15 | 0.92 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 4 | 0.92 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 4 | 0.92 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 4 | 0.92 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB1 | 9 | 0.92 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB2 | 9 | 0.92 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB3 | 9 | 0.92 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB1 | 9 | 0.92 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB2 | 9 | 0.92 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB3 | 9 | 0.92 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB1 | 9 | 0.92 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB2 | 9 | 0.92 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB3 | 9 | 0.92 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:HA | 18 | 0.92 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:HA | 18 | 0.92 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:HA | 18 | 0.92 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:ASN:H | 1 | 0.92 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:ASN:H | 1 | 0.92 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:ASN:H | 1 | 0.92 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:HA | 7 | 0.92 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:HA | 7 | 0.92 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:HA | 7 | 0.92 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:HA | 19 | 0.92 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:HA | 19 | 0.92 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:HA | 19 | 0.92 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB1 | 13 | 0.92 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB2 | 13 | 0.92 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB3 | 13 | 0.92 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB1 | 13 | 0.92 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB2 | 13 | 0.92 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB3 | 13 | 0.92 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB1 | 13 | 0.92 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB2 | 13 | 0.92 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB3 | 13 | 0.92 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 6 | 0.92 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 6 | 0.92 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 6 | 0.92 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 1 | 0.92 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 11 | 0.92 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 16 | 0.92 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 2 | 0.91 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 3 | 0.91 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 4 | 0.91 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 17 | 0.91 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 17 | 0.91 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 17 | 0.91 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 3 | 0.91 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 3 | 0.91 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 3 | 0.91 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:54:PHE:H | 14 | 0.91 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:54:PHE:H | 14 | 0.91 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:54:PHE:H | 14 | 0.91 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HE1 | 10 | 0.91 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HE2 | 10 | 0.91 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HE1 | 10 | 0.91 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HE2 | 10 | 0.91 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HE1 | 10 | 0.91 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HE2 | 10 | 0.91 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 16 | 0.91 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 16 | 0.91 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 16 | 0.91 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 16 | 0.91 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 16 | 0.91 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 16 | 0.91 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 8 | 0.91 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 8 | 0.91 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 8 | 0.91 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 8 | 0.91 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 8 | 0.91 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 8 | 0.91 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 3 | 0.91 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 3 | 0.91 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 3 | 0.91 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 4 | 0.91 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 4 | 0.91 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 4 | 0.91 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 7 | 0.91 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 7 | 0.91 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 7 | 0.91 |
| (1,3490) | 1:A:106:ARG:HB3 | 1:A:107:THR:HA | 7 | 0.91 |
| (1,3490) | 1:A:106:ARG:HB3 | 1:A:107:THR:HA | 19 | 0.91 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 2 | 0.91 |
| (1,3242) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HB | 10 | 0.91 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 6 | 0.91 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 6 | 0.91 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 6 | 0.91 |
| (1,3162) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HB3 | 15 | 0.91 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 1 | 0.91 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 1 | 0.91 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 1 | 0.91 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 8 | 0.91 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 8 | 0.91 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 8 | 0.91 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 14 | 0.91 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 14 | 0.91 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 14 | 0.91 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 6 | 0.91 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 7 | 0.91 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG21 | 1 | 0.91 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG22 | 1 | 0.91 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG23 | 1 | 0.91 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG21 | 8 | 0.91 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG22 | 8 | 0.91 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG23 | 8 | 0.91 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 0.91 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 0.91 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 0.91 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 0.91 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 0.91 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 0.91 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 0.91 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 0.91 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 0.91 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB1 | 4 | 0.91 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB2 | 4 | 0.91 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB3 | 4 | 0.91 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 9 | 0.91 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 9 | 0.91 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 9 | 0.91 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 9 | 0.91 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 9 | 0.91 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 9 | 0.91 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 9 | 0.91 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 9 | 0.91 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 9 | 0.91 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 5 | 0.91 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 5 | 0.91 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 5 | 0.91 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 5 | 0.91 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 5 | 0.91 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 5 | 0.91 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 5 | 0.91 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 5 | 0.91 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 5 | 0.91 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 20 | 0.91 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 20 | 0.91 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 20 | 0.91 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 20 | 0.91 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 20 | 0.91 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 20 | 0.91 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 20 | 0.91 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 20 | 0.91 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 20 | 0.91 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 0.91 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 0.91 |
| (1,2163) | 1:A:147:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 0.91 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 19 | 0.91 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 19 | 0.91 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 19 | 0.91 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 18 | 0.91 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 18 | 0.91 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 18 | 0.91 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 20 | 0.91 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 20 | 0.91 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 20 | 0.91 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 4 | 0.91 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 4 | 0.91 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 4 | 0.91 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 3 | 0.91 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 3 | 0.91 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 3 | 0.91 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 1 | 0.91 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 1 | 0.91 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 1 | 0.91 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 15 | 0.91 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 15 | 0.91 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 15 | 0.91 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 17 | 0.91 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 17 | 0.91 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 17 | 0.91 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG11 | 2 | 0.91 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG12 | 2 | 0.91 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG13 | 2 | 0.91 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG11 | 3 | 0.91 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG12 | 3 | 0.91 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG13 | 3 | 0.91 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG11 | 13 | 0.91 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG12 | 13 | 0.91 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG13 | 13 | 0.91 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 14 | 0.91 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 14 | 0.91 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 14 | 0.91 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:HA3 | 5 | 0.91 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:HA3 | 5 | 0.91 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:HA3 | 5 | 0.91 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:HA3 | 8 | 0.91 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:HA3 | 8 | 0.91 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:HA3 | 8 | 0.91 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 7 | 0.91 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 7 | 0.91 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 7 | 0.91 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 11 | 0.91 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 11 | 0.91 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 11 | 0.91 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 12 | 0.91 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 12 | 0.91 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 12 | 0.91 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 12 | 0.91 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 12 | 0.91 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 12 | 0.91 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 12 | 0.91 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 12 | 0.91 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 12 | 0.91 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 1 | 0.91 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 1 | 0.91 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 1 | 0.91 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 1 | 0.91 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 1 | 0.91 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 1 | 0.91 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 1 | 0.91 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 1 | 0.91 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 1 | 0.91 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 2 | 0.91 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 2 | 0.91 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 2 | 0.91 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE21 | 11 | 0.91 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE21 | 11 | 0.91 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE21 | 11 | 0.91 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 14 | 0.9 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 14 | 0.9 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 14 | 0.9 |
| (1,62) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:27:SER:HB3 | 6 | 0.9 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 2 | 0.9 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 2 | 0.9 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 2 | 0.9 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 17 | 0.9 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 17 | 0.9 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 17 | 0.9 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG11 | 17 | 0.9 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG12 | 17 | 0.9 |
| (1,3481) | 1:A:155:LYS:HD3 | 1:A:156:VAL:HG13 | 17 | 0.9 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 9 | 0.9 |
| (1,3024) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:159:GLN:HB3 | 4 | 0.9 |
| (1,3024) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:159:GLN:HB3 | 8 | 0.9 |
| (1,3024) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:159:GLN:HB3 | 14 | 0.9 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB2 | 4 | 0.9 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB2 | 4 | 0.9 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB2 | 4 | 0.9 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 13 | 0.9 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 17 | 0.9 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 8 | 0.9 |
| (1,2864) | 1:A:89:GLN:HE21 | 1:A:178:LYS:HE3 | 12 | 0.9 |
| (1,2864) | 1:A:89:GLN:HE21 | 1:A:178:LYS:HE3 | 17 | 0.9 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB1 | 5 | 0.9 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB2 | 5 | 0.9 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB3 | 5 | 0.9 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:134:GLN:HE22 | 19 | 0.9 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:134:GLN:HE22 | 19 | 0.9 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:134:GLN:HE22 | 19 | 0.9 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 2 | 0.9 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 2 | 0.9 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 2 | 0.9 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 2 | 0.9 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 2 | 0.9 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 2 | 0.9 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 2 | 0.9 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 2 | 0.9 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 2 | 0.9 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2165) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HA | 10 | 0.9 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 13 | 0.9 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG21 | 4 | 0.9 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG22 | 4 | 0.9 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG23 | 4 | 0.9 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG21 | 4 | 0.9 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG22 | 4 | 0.9 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG23 | 4 | 0.9 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG21 | 4 | 0.9 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG22 | 4 | 0.9 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG23 | 4 | 0.9 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG21 | 13 | 0.9 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG22 | 13 | 0.9 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG23 | 13 | 0.9 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG21 | 13 | 0.9 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG22 | 13 | 0.9 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG23 | 13 | 0.9 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG21 | 13 | 0.9 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG22 | 13 | 0.9 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG23 | 13 | 0.9 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HA | 8 | 0.9 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HA | 8 | 0.9 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HA | 8 | 0.9 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 17 | 0.9 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 17 | 0.9 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 17 | 0.9 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 15 | 0.9 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 18 | 0.9 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 18 | 0.9 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 18 | 0.9 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 7 | 0.9 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 7 | 0.9 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 7 | 0.9 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 7 | 0.9 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 7 | 0.9 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 7 | 0.9 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 9 | 0.9 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 9 | 0.9 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 9 | 0.9 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 1 | 0.9 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 1 | 0.9 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 1 | 0.9 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 2 | 0.9 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 2 | 0.9 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 2 | 0.9 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 8 | 0.9 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 8 | 0.9 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 8 | 0.9 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 12 | 0.9 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 12 | 0.9 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 12 | 0.9 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 17 | 0.9 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 17 | 0.9 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 17 | 0.9 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 12 | 0.9 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 12 | 0.9 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 12 | 0.9 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 12 | 0.9 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 12 | 0.9 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 12 | 0.9 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 12 | 0.9 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 12 | 0.9 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 12 | 0.9 |
| (1,1585) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:112:THR:H | 10 | 0.9 |
| (1,1585) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:112:THR:H | 10 | 0.9 |
| (1,1585) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:112:THR:H | 10 | 0.9 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB1 | 12 | 0.9 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB2 | 12 | 0.9 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB3 | 12 | 0.9 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB1 | 12 | 0.9 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB2 | 12 | 0.9 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB3 | 12 | 0.9 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB1 | 12 | 0.9 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB2 | 12 | 0.9 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB3 | 12 | 0.9 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:HA | 10 | 0.9 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:HA | 10 | 0.9 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:HA | 10 | 0.9 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:HA3 | 1 | 0.9 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:HA3 | 1 | 0.9 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:HA3 | 1 | 0.9 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:HA3 | 12 | 0.9 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:HA3 | 12 | 0.9 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:HA3 | 12 | 0.9 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 20 | 0.9 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 20 | 0.9 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 20 | 0.9 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 10 | 0.9 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 10 | 0.9 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 10 | 0.9 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 10 | 0.9 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 10 | 0.9 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 10 | 0.9 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 10 | 0.9 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 10 | 0.9 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 10 | 0.9 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 18 | 0.9 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 18 | 0.9 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 18 | 0.9 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 18 | 0.9 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 18 | 0.9 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 18 | 0.9 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 18 | 0.9 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 18 | 0.9 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 18 | 0.9 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG2 | 13 | 0.9 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG3 | 13 | 0.9 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG2 | 13 | 0.9 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG3 | 13 | 0.9 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 13 | 0.9 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 13 | 0.9 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:HA | 4 | 0.9 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:HA | 4 | 0.9 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:HA | 4 | 0.9 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:H | 9 | 0.9 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:H | 9 | 0.9 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:H | 9 | 0.9 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HA | 18 | 0.9 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HA | 18 | 0.9 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HA | 18 | 0.9 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 11 | 0.9 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 11 | 0.9 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 11 | 0.9 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 11 | 0.9 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 11 | 0.9 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 11 | 0.9 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 5 | 0.9 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 9 | 0.89 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 17 | 0.89 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 5 | 0.89 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 5 | 0.89 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 5 | 0.89 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 11 | 0.89 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 11 | 0.89 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 11 | 0.89 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 13 | 0.89 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 13 | 0.89 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 13 | 0.89 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 8 | 0.89 |
| (1,3490) | 1:A:106:ARG:HB3 | 1:A:107:THR:HA | 14 | 0.89 |
| (1,3490) | 1:A:106:ARG:HB3 | 1:A:107:THR:HA | 18 | 0.89 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 8 | 0.89 |
| (1,331) | 1:A:150:ALA:H | 1:A:178:LYS:HE3 | 10 | 0.89 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 9 | 0.89 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 16 | 0.89 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 5 | 0.89 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 15 | 0.89 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 15 | 0.89 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 15 | 0.89 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:H | 13 | 0.89 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:H | 13 | 0.89 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:H | 13 | 0.89 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 19 | 0.89 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG21 | 20 | 0.89 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG22 | 20 | 0.89 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG23 | 20 | 0.89 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB1 | 11 | 0.89 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB2 | 11 | 0.89 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB3 | 11 | 0.89 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG11 | 9 | 0.89 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG12 | 9 | 0.89 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG13 | 9 | 0.89 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 10 | 0.89 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 10 | 0.89 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 10 | 0.89 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 14 | 0.89 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 14 | 0.89 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 14 | 0.89 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:72:ALA:H | 19 | 0.89 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:72:ALA:H | 19 | 0.89 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:72:ALA:H | 19 | 0.89 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 4 | 0.89 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 4 | 0.89 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 4 | 0.89 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 6 | 0.89 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 6 | 0.89 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 6 | 0.89 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 7 | 0.89 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 7 | 0.89 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 7 | 0.89 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 13 | 0.89 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 13 | 0.89 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 13 | 0.89 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 18 | 0.89 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 18 | 0.89 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 18 | 0.89 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB1 | 8 | 0.89 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB2 | 8 | 0.89 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB3 | 8 | 0.89 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB1 | 8 | 0.89 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB2 | 8 | 0.89 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB3 | 8 | 0.89 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB1 | 8 | 0.89 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB2 | 8 | 0.89 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB3 | 8 | 0.89 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:HA3 | 15 | 0.89 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:HA3 | 15 | 0.89 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:HA3 | 15 | 0.89 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:HA3 | 17 | 0.89 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:HA3 | 17 | 0.89 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:HA3 | 17 | 0.89 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 12 | 0.89 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 12 | 0.89 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 12 | 0.89 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 15 | 0.89 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 15 | 0.89 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 15 | 0.89 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 18 | 0.89 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 18 | 0.89 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 18 | 0.89 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 2 | 0.89 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 2 | 0.89 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 2 | 0.89 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 2 | 0.89 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 2 | 0.89 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 2 | 0.89 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 2 | 0.89 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 2 | 0.89 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 2 | 0.89 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:HA | 12 | 0.89 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:HA | 12 | 0.89 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:HA | 12 | 0.89 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:H | 20 | 0.89 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:H | 20 | 0.89 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:H | 20 | 0.89 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB1 | 2 | 0.89 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB2 | 2 | 0.89 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB3 | 2 | 0.89 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB1 | 2 | 0.89 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB2 | 2 | 0.89 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB3 | 2 | 0.89 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB1 | 2 | 0.89 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB2 | 2 | 0.89 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB3 | 2 | 0.89 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 3 | 0.89 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 20 | 0.89 |
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 7 | 0.88 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 5 | 0.88 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 16 | 0.88 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 1 | 0.88 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 7 | 0.88 |
| (1,3242) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HB | 5 | 0.88 |
| (1,3024) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:159:GLN:HB3 | 17 | 0.88 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:H | 5 | 0.88 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:H | 5 | 0.88 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:H | 5 | 0.88 |
| (1,2851) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:130:THR:HA | 6 | 0.88 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 12 | 0.88 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 12 | 0.88 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 12 | 0.88 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 6 | 0.88 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 5 | 0.88 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 5 | 0.88 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 5 | 0.88 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 13 | 0.88 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 13 | 0.88 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 13 | 0.88 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 13 | 0.88 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 13 | 0.88 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 13 | 0.88 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 13 | 0.88 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 13 | 0.88 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 13 | 0.88 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 19 | 0.88 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 19 | 0.88 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 19 | 0.88 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 19 | 0.88 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 19 | 0.88 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 19 | 0.88 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 19 | 0.88 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 19 | 0.88 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 19 | 0.88 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HA | 9 | 0.88 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HA | 9 | 0.88 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HA | 9 | 0.88 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG21 | 13 | 0.88 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG22 | 13 | 0.88 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG23 | 13 | 0.88 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG21 | 13 | 0.88 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG22 | 13 | 0.88 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG23 | 13 | 0.88 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG21 | 13 | 0.88 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG22 | 13 | 0.88 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG23 | 13 | 0.88 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 1 | 0.88 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 1 | 0.88 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 1 | 0.88 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:173:GLY:HA2 | 4 | 0.88 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:173:GLY:HA2 | 4 | 0.88 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:173:GLY:HA2 | 4 | 0.88 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 16 | 0.88 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 16 | 0.88 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 16 | 0.88 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 5 | 0.88 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 5 | 0.88 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 5 | 0.88 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 5 | 0.88 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 5 | 0.88 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 5 | 0.88 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 9 | 0.88 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 9 | 0.88 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 9 | 0.88 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 10 | 0.88 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 10 | 0.88 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 10 | 0.88 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 2 | 0.88 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 2 | 0.88 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 2 | 0.88 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 7 | 0.88 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 7 | 0.88 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 7 | 0.88 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 7 | 0.88 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 7 | 0.88 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 7 | 0.88 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 7 | 0.88 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 7 | 0.88 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 7 | 0.88 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 19 | 0.88 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 19 | 0.88 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 19 | 0.88 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 19 | 0.88 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 19 | 0.88 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 19 | 0.88 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 19 | 0.88 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 19 | 0.88 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 19 | 0.88 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:H | 8 | 0.88 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:H | 8 | 0.88 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:H | 8 | 0.88 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 9 | 0.88 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 9 | 0.88 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 9 | 0.88 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 9 | 0.88 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 9 | 0.88 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 9 | 0.88 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 9 | 0.88 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 9 | 0.88 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 9 | 0.88 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB1 | 9 | 0.88 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB2 | 9 | 0.88 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB3 | 9 | 0.88 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB1 | 9 | 0.88 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB2 | 9 | 0.88 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB3 | 9 | 0.88 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB1 | 9 | 0.88 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB2 | 9 | 0.88 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB3 | 9 | 0.88 |
| (1,1323) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:118:PHE:HA | 16 | 0.88 |
| (1,1323) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:118:PHE:HA | 16 | 0.88 |
| (1,1323) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:118:PHE:HA | 16 | 0.88 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 5 | 0.87 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 14 | 0.87 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 14 | 0.87 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 14 | 0.87 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 3 | 0.87 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 3 | 0.87 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 3 | 0.87 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 14 | 0.87 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 14 | 0.87 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 14 | 0.87 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 14 | 0.87 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 14 | 0.87 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 14 | 0.87 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 3 | 0.87 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 3 | 0.87 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 7 | 0.87 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 7 | 0.87 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 7 | 0.87 |
| (1,3490) | 1:A:106:ARG:HB3 | 1:A:107:THR:HA | 8 | 0.87 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 15 | 0.87 |
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 3 | 0.87 |
| (1,3024) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:159:GLN:HB3 | 13 | 0.87 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 5 | 0.87 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 5 | 0.87 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 5 | 0.87 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 11 | 0.87 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 14 | 0.87 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 10 | 0.87 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 10 | 0.87 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 10 | 0.87 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 11 | 0.87 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB1 | 19 | 0.87 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB2 | 19 | 0.87 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB3 | 19 | 0.87 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 5 | 0.87 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 5 | 0.87 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 5 | 0.87 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 19 | 0.87 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 19 | 0.87 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 19 | 0.87 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 9 | 0.87 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 9 | 0.87 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 9 | 0.87 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 3 | 0.87 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 20 | 0.87 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 9 | 0.87 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 9 | 0.87 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 9 | 0.87 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 4 | 0.87 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 4 | 0.87 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 4 | 0.87 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 13 | 0.87 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 13 | 0.87 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 13 | 0.87 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 18 | 0.87 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 18 | 0.87 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 18 | 0.87 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 3 | 0.87 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 3 | 0.87 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 3 | 0.87 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:173:GLY:HA2 | 10 | 0.87 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:173:GLY:HA2 | 10 | 0.87 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:173:GLY:HA2 | 10 | 0.87 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:173:GLY:HA2 | 11 | 0.87 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:173:GLY:HA2 | 11 | 0.87 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:173:GLY:HA2 | 11 | 0.87 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:59:ASN:HB3 | 10 | 0.87 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:59:ASN:HB3 | 10 | 0.87 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:59:ASN:HB3 | 10 | 0.87 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 0.87 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 0.87 |
| (1,1815) | 1:A:38:ARG:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 0.87 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 18 | 0.87 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 18 | 0.87 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 18 | 0.87 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 14 | 0.87 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 14 | 0.87 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 14 | 0.87 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:44:GLN:H | 10 | 0.87 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:44:GLN:H | 10 | 0.87 |
| (1,1674) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:44:GLN:H | 10 | 0.87 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:HA3 | 16 | 0.87 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:HA3 | 16 | 0.87 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:HA3 | 16 | 0.87 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 20 | 0.87 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 20 | 0.87 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 20 | 0.87 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 10 | 0.87 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 10 | 0.87 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 10 | 0.87 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:HA | 2 | 0.87 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:HA | 2 | 0.87 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:HA | 2 | 0.87 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:H | 7 | 0.87 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:H | 7 | 0.87 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:H | 7 | 0.87 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:H | 19 | 0.87 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:H | 19 | 0.87 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:H | 19 | 0.87 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB1 | 17 | 0.87 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB2 | 17 | 0.87 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB3 | 17 | 0.87 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB1 | 17 | 0.87 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB2 | 17 | 0.87 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB3 | 17 | 0.87 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB1 | 17 | 0.87 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB2 | 17 | 0.87 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB3 | 17 | 0.87 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:124:LEU:HD11 | 9 | 0.87 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:124:LEU:HD12 | 9 | 0.87 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:124:LEU:HD13 | 9 | 0.87 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:124:LEU:HD11 | 9 | 0.87 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:124:LEU:HD12 | 9 | 0.87 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:124:LEU:HD13 | 9 | 0.87 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:124:LEU:HD11 | 9 | 0.87 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:124:LEU:HD12 | 9 | 0.87 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:124:LEU:HD13 | 9 | 0.87 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 8 | 0.87 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 8 | 0.87 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 8 | 0.87 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 8 | 0.87 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 8 | 0.87 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 8 | 0.87 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 0.87 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 0.87 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 0.87 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE21 | 2 | 0.87 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE21 | 2 | 0.87 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE21 | 2 | 0.87 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 1 | 0.86 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 19 | 0.86 |
| (1,3934) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:138:PHE:HZ | 17 | 0.86 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 2 | 0.86 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 2 | 0.86 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 17 | 0.86 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 17 | 0.86 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 17 | 0.86 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 1 | 0.86 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 1 | 0.86 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 1 | 0.86 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 0.86 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 0.86 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 0.86 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 0.86 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 0.86 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 0.86 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 0.86 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 0.86 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 0.86 |
| (1,3512) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:120:SER:HB3 | 20 | 0.86 |
| (1,3512) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:120:SER:HB3 | 20 | 0.86 |
| (1,3512) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:120:SER:HB3 | 20 | 0.86 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 17 | 0.86 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 20 | 0.86 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 1 | 0.86 |
| (1,3024) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:159:GLN:HB3 | 20 | 0.86 |
| (1,2968) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:18:ASN:HB2 | 16 | 0.86 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 8 | 0.86 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 16 | 0.86 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 1 | 0.86 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 0.86 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 0.86 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 0.86 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 0.86 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 0.86 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 0.86 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 0.86 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 0.86 |
| (1,2455) | 1:A:148:ALA:HB3 | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 0.86 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:H | 20 | 0.86 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:H | 20 | 0.86 |
| (1,239) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:H | 20 | 0.86 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 7 | 0.86 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG21 | 16 | 0.86 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG22 | 16 | 0.86 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG23 | 16 | 0.86 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG21 | 16 | 0.86 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG22 | 16 | 0.86 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG23 | 16 | 0.86 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG21 | 16 | 0.86 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG22 | 16 | 0.86 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG23 | 16 | 0.86 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 12 | 0.86 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 12 | 0.86 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 12 | 0.86 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 1 | 0.86 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 1 | 0.86 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 1 | 0.86 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 6 | 0.86 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 6 | 0.86 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 6 | 0.86 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:59:ASN:HB3 | 13 | 0.86 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:59:ASN:HB3 | 13 | 0.86 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:59:ASN:HB3 | 13 | 0.86 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 11 | 0.86 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 11 | 0.86 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 11 | 0.86 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 5 | 0.86 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 5 | 0.86 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 5 | 0.86 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HZ | 4 | 0.86 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HZ | 4 | 0.86 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HZ | 4 | 0.86 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:HA3 | 2 | 0.86 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:HA3 | 2 | 0.86 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:HA3 | 2 | 0.86 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:HA3 | 19 | 0.86 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:HA3 | 19 | 0.86 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:HA3 | 19 | 0.86 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HA | 15 | 0.86 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HA | 15 | 0.86 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HA | 15 | 0.86 |
| (1,1467) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:LYS:HG2 | 18 | 0.86 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:H | 4 | 0.86 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:H | 4 | 0.86 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:H | 4 | 0.86 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:H | 3 | 0.86 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:H | 3 | 0.86 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:H | 3 | 0.86 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:H | 10 | 0.86 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:H | 10 | 0.86 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:H | 10 | 0.86 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:H | 13 | 0.86 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:H | 13 | 0.86 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:H | 13 | 0.86 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB1 | 8 | 0.86 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB2 | 8 | 0.86 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB3 | 8 | 0.86 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB1 | 8 | 0.86 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB2 | 8 | 0.86 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB3 | 8 | 0.86 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB1 | 8 | 0.86 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB2 | 8 | 0.86 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB3 | 8 | 0.86 |
| (1,1312) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:124:LEU:HD11 | 10 | 0.86 |
| (1,1312) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:124:LEU:HD12 | 10 | 0.86 |
| (1,1312) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:124:LEU:HD13 | 10 | 0.86 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 16 | 0.86 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 16 | 0.86 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 16 | 0.86 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 16 | 0.86 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 16 | 0.86 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 16 | 0.86 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 13 | 0.86 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 13 | 0.86 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 13 | 0.86 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 4 | 0.85 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 4 | 0.85 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 4 | 0.85 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 12 | 0.85 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 12 | 0.85 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 12 | 0.85 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 12 | 0.85 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 12 | 0.85 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 12 | 0.85 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 12 | 0.85 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 12 | 0.85 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 12 | 0.85 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 12 | 0.85 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 12 | 0.85 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 12 | 0.85 |
| (1,3785) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:75:GLY:HA3 | 10 | 0.85 |
| (1,3785) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:75:GLY:HA3 | 10 | 0.85 |
| (1,3785) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:75:GLY:HA3 | 10 | 0.85 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 7 | 0.85 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 7 | 0.85 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 7 | 0.85 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 9 | 0.85 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 9 | 0.85 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 9 | 0.85 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 2 | 0.85 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 4 | 0.85 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 19 | 0.85 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 17 | 0.85 |
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 4 | 0.85 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 1 | 0.85 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 1 | 0.85 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 1 | 0.85 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 8 | 0.85 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 8 | 0.85 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 8 | 0.85 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:59:ASN:HB3 | 7 | 0.85 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:59:ASN:HB3 | 7 | 0.85 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:59:ASN:HB3 | 7 | 0.85 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 1 | 0.85 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 1 | 0.85 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 1 | 0.85 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 1 | 0.85 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 1 | 0.85 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 1 | 0.85 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 3 | 0.85 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 3 | 0.85 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 3 | 0.85 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 3 | 0.85 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 3 | 0.85 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 3 | 0.85 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 9 | 0.85 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 9 | 0.85 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 9 | 0.85 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 11 | 0.85 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 11 | 0.85 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 11 | 0.85 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 6 | 0.85 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 6 | 0.85 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 6 | 0.85 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 20 | 0.85 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 20 | 0.85 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 20 | 0.85 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 20 | 0.85 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 20 | 0.85 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 20 | 0.85 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 20 | 0.85 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 20 | 0.85 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 20 | 0.85 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:149:ASN:HA | 4 | 0.85 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:149:ASN:HA | 4 | 0.85 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:149:ASN:HA | 4 | 0.85 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG11 | 15 | 0.85 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG12 | 15 | 0.85 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG13 | 15 | 0.85 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:HA3 | 7 | 0.85 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:HA3 | 7 | 0.85 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:HA3 | 7 | 0.85 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 16 | 0.85 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 16 | 0.85 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 16 | 0.85 |
| (1,1467) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:LYS:HG2 | 6 | 0.85 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:H | 4 | 0.85 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:H | 4 | 0.85 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:H | 4 | 0.85 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:H | 15 | 0.85 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:H | 15 | 0.85 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:H | 15 | 0.85 |
| (1,857) | 1:A:49:SER:H | 1:A:136:ARG:HD3 | 4 | 0.84 |
| (1,502) | 1:A:16:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:H | 6 | 0.84 |
| (1,502) | 1:A:16:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:H | 6 | 0.84 |
| (1,502) | 1:A:16:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:H | 6 | 0.84 |
| (1,495) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:15:GLU:H | 18 | 0.84 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG21 | 16 | 0.84 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG22 | 16 | 0.84 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG23 | 16 | 0.84 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 3 | 0.84 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 5 | 0.84 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 20 | 0.84 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 11 | 0.84 |
| (1,3024) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:159:GLN:HB3 | 2 | 0.84 |
| (1,3024) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:159:GLN:HB3 | 5 | 0.84 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 5 | 0.84 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 20 | 0.84 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 13 | 0.84 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 13 | 0.84 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 13 | 0.84 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 11 | 0.84 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 17 | 0.84 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 17 | 0.84 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 17 | 0.84 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG11 | 4 | 0.84 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG12 | 4 | 0.84 |
| (1,1923) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HG13 | 4 | 0.84 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG21 | 14 | 0.84 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG22 | 14 | 0.84 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG23 | 14 | 0.84 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 12 | 0.84 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 12 | 0.84 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 12 | 0.84 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 19 | 0.84 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 19 | 0.84 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 19 | 0.84 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 13 | 0.84 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 13 | 0.84 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 13 | 0.84 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 8 | 0.84 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 8 | 0.84 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 8 | 0.84 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:H | 12 | 0.84 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:H | 12 | 0.84 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:H | 12 | 0.84 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:H | 16 | 0.84 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:H | 16 | 0.84 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:H | 16 | 0.84 |
| (1,1297) | 1:A:120:SER:HA | 1:A:121:GLU:HG3 | 17 | 0.84 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 1 | 0.84 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 1 | 0.84 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 1 | 0.84 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 1 | 0.84 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 1 | 0.84 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 1 | 0.84 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 1 | 0.84 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 1 | 0.84 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 1 | 0.84 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 6 | 0.84 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 14 | 0.83 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 14 | 0.83 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 14 | 0.83 |
| (1,502) | 1:A:16:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:H | 7 | 0.83 |
| (1,502) | 1:A:16:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:H | 7 | 0.83 |
| (1,502) | 1:A:16:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:H | 7 | 0.83 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 8 | 0.83 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 8 | 0.83 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 8 | 0.83 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 8 | 0.83 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 8 | 0.83 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 8 | 0.83 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 14 | 0.83 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 14 | 0.83 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 14 | 0.83 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 10 | 0.83 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 12 | 0.83 |
| (1,3322) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:159:GLN:HB3 | 10 | 0.83 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 12 | 0.83 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 12 | 0.83 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 12 | 0.83 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 17 | 0.83 |
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 19 | 0.83 |
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 9 | 0.83 |
| (1,2867) | 1:A:149:ASN:HB3 | 1:A:178:LYS:HE3 | 6 | 0.83 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 3 | 0.83 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 10 | 0.83 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 4 | 0.83 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 4 | 0.83 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 4 | 0.83 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 11 | 0.83 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 11 | 0.83 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 11 | 0.83 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 11 | 0.83 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 11 | 0.83 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 11 | 0.83 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 11 | 0.83 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 11 | 0.83 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 11 | 0.83 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HA | 1 | 0.83 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HA | 1 | 0.83 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HA | 1 | 0.83 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 6 | 0.83 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 6 | 0.83 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 6 | 0.83 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 13 | 0.83 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 13 | 0.83 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 13 | 0.83 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 4 | 0.83 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 4 | 0.83 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 4 | 0.83 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 11 | 0.83 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 11 | 0.83 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 11 | 0.83 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 15 | 0.83 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 15 | 0.83 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 15 | 0.83 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 15 | 0.83 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 15 | 0.83 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 15 | 0.83 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 19 | 0.83 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 19 | 0.83 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 19 | 0.83 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 19 | 0.83 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 19 | 0.83 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 19 | 0.83 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:H | 12 | 0.83 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:H | 12 | 0.83 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:H | 12 | 0.83 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:HA | 11 | 0.83 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:HA | 11 | 0.83 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:HA | 11 | 0.83 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 3 | 0.83 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 3 | 0.83 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 3 | 0.83 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 3 | 0.83 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 3 | 0.83 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 3 | 0.83 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 3 | 0.83 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 3 | 0.83 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 3 | 0.83 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 0.83 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 0.83 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 0.83 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 0.83 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 0.83 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 0.83 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 0.83 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 0.83 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 0.83 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 3 | 0.83 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 3 | 0.83 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 3 | 0.83 |
| (1,495) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:15:GLU:H | 1 | 0.82 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 2 | 0.82 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 8 | 0.82 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 9 | 0.82 |
| (1,3934) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:138:PHE:HZ | 3 | 0.82 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 5 | 0.82 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 5 | 0.82 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 20 | 0.82 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 20 | 0.82 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 20 | 0.82 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 20 | 0.82 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 20 | 0.82 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 20 | 0.82 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD1 | 2 | 0.82 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD2 | 2 | 0.82 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD1 | 2 | 0.82 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD2 | 2 | 0.82 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD1 | 2 | 0.82 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD2 | 2 | 0.82 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 15 | 0.82 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 15 | 0.82 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE3 | 16 | 0.82 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE3 | 16 | 0.82 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE3 | 16 | 0.82 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 15 | 0.82 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 15 | 0.82 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 15 | 0.82 |
| (1,3490) | 1:A:106:ARG:HB3 | 1:A:107:THR:HA | 1 | 0.82 |
| (1,331) | 1:A:150:ALA:H | 1:A:178:LYS:HE3 | 17 | 0.82 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD11 | 3 | 0.82 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD12 | 3 | 0.82 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD13 | 3 | 0.82 |
| (1,3072) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:130:THR:HB | 1 | 0.82 |
| (1,3024) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:159:GLN:HB3 | 12 | 0.82 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 18 | 0.82 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 15 | 0.82 |
| (1,2941) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:13:LYS:HA | 4 | 0.82 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 12 | 0.82 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 17 | 0.82 |
| (1,2864) | 1:A:89:GLN:HE21 | 1:A:178:LYS:HE3 | 7 | 0.82 |
| (1,2745) | 1:A:104:LEU:HB2 | 1:A:108:GLY:HA3 | 11 | 0.82 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 12 | 0.82 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 12 | 0.82 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 12 | 0.82 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 17 | 0.82 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 17 | 0.82 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 17 | 0.82 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 17 | 0.82 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 17 | 0.82 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 17 | 0.82 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 17 | 0.82 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 17 | 0.82 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 17 | 0.82 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:H | 19 | 0.82 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:H | 19 | 0.82 |
| (1,2217) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:H | 19 | 0.82 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 13 | 0.82 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 13 | 0.82 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 13 | 0.82 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 13 | 0.82 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 13 | 0.82 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 13 | 0.82 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 13 | 0.82 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 13 | 0.82 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 13 | 0.82 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 2 | 0.82 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 2 | 0.82 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 2 | 0.82 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 8 | 0.82 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 8 | 0.82 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 8 | 0.82 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:173:GLY:HA2 | 19 | 0.82 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:173:GLY:HA2 | 19 | 0.82 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:173:GLY:HA2 | 19 | 0.82 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:59:ASN:HB3 | 3 | 0.82 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:59:ASN:HB3 | 3 | 0.82 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:59:ASN:HB3 | 3 | 0.82 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:59:ASN:HB3 | 18 | 0.82 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:59:ASN:HB3 | 18 | 0.82 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:59:ASN:HB3 | 18 | 0.82 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG21 | 4 | 0.82 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG22 | 4 | 0.82 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG23 | 4 | 0.82 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 7 | 0.82 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 7 | 0.82 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 7 | 0.82 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:H | 3 | 0.82 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:H | 3 | 0.82 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:H | 3 | 0.82 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 19 | 0.82 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 19 | 0.82 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 19 | 0.82 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG11 | 4 | 0.82 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG12 | 4 | 0.82 |
| (1,1644) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:101:VAL:HG13 | 4 | 0.82 |
| (1,158) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:113:LEU:H | 6 | 0.82 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB1 | 2 | 0.82 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB2 | 2 | 0.82 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB3 | 2 | 0.82 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB1 | 2 | 0.82 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB2 | 2 | 0.82 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB3 | 2 | 0.82 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB1 | 2 | 0.82 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB2 | 2 | 0.82 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB3 | 2 | 0.82 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG21 | 15 | 0.82 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG22 | 15 | 0.82 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:181:VAL:HG23 | 15 | 0.82 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG21 | 15 | 0.82 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG22 | 15 | 0.82 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:181:VAL:HG23 | 15 | 0.82 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG21 | 15 | 0.82 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG22 | 15 | 0.82 |
| (1,1437) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:181:VAL:HG23 | 15 | 0.82 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:H | 14 | 0.82 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:H | 14 | 0.82 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:H | 14 | 0.82 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 18 | 0.82 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 18 | 0.82 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 18 | 0.82 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 18 | 0.82 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 18 | 0.82 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 18 | 0.82 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 18 | 0.82 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 18 | 0.82 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 18 | 0.82 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB2 | 14 | 0.82 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB2 | 14 | 0.82 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB2 | 14 | 0.82 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 14 | 0.82 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 14 | 0.82 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 14 | 0.82 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 14 | 0.82 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 14 | 0.82 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 14 | 0.82 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 12 | 0.82 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG11 | 7 | 0.81 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG12 | 7 | 0.81 |
| (1,969) | 1:A:18:ASN:HD22 | 1:A:65:VAL:HG13 | 7 | 0.81 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 8 | 0.81 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 8 | 0.81 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 8 | 0.81 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 1 | 0.81 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 1 | 0.81 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 1 | 0.81 |
| (1,420) | 1:A:73:PHE:H | 1:A:111:LEU:HD11 | 16 | 0.81 |
| (1,420) | 1:A:73:PHE:H | 1:A:111:LEU:HD12 | 16 | 0.81 |
| (1,420) | 1:A:73:PHE:H | 1:A:111:LEU:HD13 | 16 | 0.81 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 13 | 0.81 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 4 | 0.81 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 4 | 0.81 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 4 | 0.81 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 4 | 0.81 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 4 | 0.81 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 4 | 0.81 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 15 | 0.81 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 15 | 0.81 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 15 | 0.81 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 15 | 0.81 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 15 | 0.81 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 15 | 0.81 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 2 | 0.81 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 2 | 0.81 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 2 | 0.81 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 4 | 0.81 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 4 | 0.81 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 4 | 0.81 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 4 | 0.81 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 4 | 0.81 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 4 | 0.81 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 6 | 0.81 |
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 14 | 0.81 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 20 | 0.81 |
| (1,3024) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:159:GLN:HB3 | 1 | 0.81 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:H | 6 | 0.81 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:H | 6 | 0.81 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:H | 6 | 0.81 |
| (1,2968) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:18:ASN:HB2 | 6 | 0.81 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 13 | 0.81 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB1 | 9 | 0.81 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB2 | 9 | 0.81 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB3 | 9 | 0.81 |
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 13 | 0.81 |
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 18 | 0.81 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 2 | 0.81 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 2 | 0.81 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 2 | 0.81 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 7 | 0.81 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 7 | 0.81 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 7 | 0.81 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 3 | 0.81 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 3 | 0.81 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 3 | 0.81 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 7 | 0.81 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 7 | 0.81 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 7 | 0.81 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 16 | 0.81 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 16 | 0.81 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 16 | 0.81 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB3 | 7 | 0.81 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB3 | 7 | 0.81 |
| (1,1969) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB3 | 7 | 0.81 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG21 | 4 | 0.81 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG22 | 4 | 0.81 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG23 | 4 | 0.81 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG21 | 4 | 0.81 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG22 | 4 | 0.81 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG23 | 4 | 0.81 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG21 | 4 | 0.81 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG22 | 4 | 0.81 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG23 | 4 | 0.81 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 11 | 0.81 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 11 | 0.81 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 11 | 0.81 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 11 | 0.81 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 11 | 0.81 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 11 | 0.81 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:149:ASN:HA | 7 | 0.81 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:149:ASN:HA | 7 | 0.81 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:149:ASN:HA | 7 | 0.81 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 15 | 0.81 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 15 | 0.81 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 15 | 0.81 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 15 | 0.81 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 15 | 0.81 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 15 | 0.81 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 15 | 0.81 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 15 | 0.81 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 15 | 0.81 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 15 | 0.81 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 15 | 0.81 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 15 | 0.81 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 15 | 0.81 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 15 | 0.81 |
| (1,1260) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 15 | 0.81 |
| (1,1094) | 1:A:157:GLN:HB2 | 1:A:159:GLN:HE21 | 19 | 0.81 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 8 | 0.8 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 12 | 0.8 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 12 | 0.8 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 12 | 0.8 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 11 | 0.8 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 11 | 0.8 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 11 | 0.8 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 11 | 0.8 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 11 | 0.8 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 11 | 0.8 |
| (1,3969) | 1:A:11:HIS:HB2 | 1:A:11:HIS:HD2 | 13 | 0.8 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 1 | 0.8 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 3 | 0.8 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 6 | 0.8 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 15 | 0.8 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 18 | 0.8 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 19 | 0.8 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 18 | 0.8 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 18 | 0.8 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG13 | 6 | 0.8 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG13 | 6 | 0.8 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG13 | 6 | 0.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 19 | 0.8 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 19 | 0.8 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 19 | 0.8 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 10 | 0.8 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 10 | 0.8 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 10 | 0.8 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 10 | 0.8 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 10 | 0.8 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 10 | 0.8 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 7 | 0.8 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 7 | 0.8 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 7 | 0.8 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 13 | 0.8 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 13 | 0.8 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 13 | 0.8 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 14 | 0.8 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 16 | 0.8 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB2 | 18 | 0.8 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB2 | 18 | 0.8 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB2 | 18 | 0.8 |
| (1,3322) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:159:GLN:HB3 | 17 | 0.8 |
| (1,331) | 1:A:150:ALA:H | 1:A:178:LYS:HE3 | 2 | 0.8 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 9 | 0.8 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 3 | 0.8 |
| (1,3024) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:159:GLN:HB3 | 9 | 0.8 |
| (1,2899) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:121:GLU:HG2 | 18 | 0.8 |
| (1,2899) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:121:GLU:HG2 | 18 | 0.8 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG11 | 15 | 0.8 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG12 | 15 | 0.8 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG13 | 15 | 0.8 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 6 | 0.8 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 6 | 0.8 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 6 | 0.8 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 16 | 0.8 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 16 | 0.8 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 16 | 0.8 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:173:GLY:HA2 | 14 | 0.8 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:173:GLY:HA2 | 14 | 0.8 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:173:GLY:HA2 | 14 | 0.8 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:173:GLY:HA2 | 17 | 0.8 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:173:GLY:HA2 | 17 | 0.8 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:173:GLY:HA2 | 17 | 0.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 6 | 0.8 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 6 | 0.8 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 6 | 0.8 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 6 | 0.8 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 6 | 0.8 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 6 | 0.8 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG21 | 19 | 0.8 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG22 | 19 | 0.8 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG23 | 19 | 0.8 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 7 | 0.8 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 7 | 0.8 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 7 | 0.8 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 5 | 0.8 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 5 | 0.8 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 5 | 0.8 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HZ | 9 | 0.8 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HZ | 9 | 0.8 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HZ | 9 | 0.8 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 15 | 0.8 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 15 | 0.8 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 15 | 0.8 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 12 | 0.8 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 12 | 0.8 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 12 | 0.8 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:HA3 | 14 | 0.8 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:HA3 | 14 | 0.8 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:HA3 | 14 | 0.8 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 0.8 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 0.8 |
| (1,1522) | 1:A:23:VAL:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 0.8 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 17 | 0.8 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 17 | 0.8 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 17 | 0.8 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE22 | 7 | 0.8 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE22 | 7 | 0.8 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE22 | 7 | 0.8 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:H | 11 | 0.8 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:H | 11 | 0.8 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:H | 11 | 0.8 |
| (1,1310) | 1:A:67:SER:HA | 1:A:124:LEU:HD11 | 13 | 0.8 |
| (1,1310) | 1:A:67:SER:HA | 1:A:124:LEU:HD12 | 13 | 0.8 |
| (1,1310) | 1:A:67:SER:HA | 1:A:124:LEU:HD13 | 13 | 0.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1094) | 1:A:157:GLN:HB2 | 1:A:159:GLN:HE21 | 8 | 0.8 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 15 | 0.79 |
| (1,420) | 1:A:73:PHE:H | 1:A:111:LEU:HD11 | 20 | 0.79 |
| (1,420) | 1:A:73:PHE:H | 1:A:111:LEU:HD12 | 20 | 0.79 |
| (1,420) | 1:A:73:PHE:H | 1:A:111:LEU:HD13 | 20 | 0.79 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG21 | 5 | 0.79 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG22 | 5 | 0.79 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG23 | 5 | 0.79 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 19 | 0.79 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 19 | 0.79 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 19 | 0.79 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 19 | 0.79 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 19 | 0.79 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 19 | 0.79 |
| (1,3969) | 1:A:11:HIS:HB2 | 1:A:11:HIS:HD2 | 16 | 0.79 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 3 | 0.79 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 3 | 0.79 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 20 | 0.79 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 20 | 0.79 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 12 | 0.79 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 12 | 0.79 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 4 | 0.79 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 4 | 0.79 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 4 | 0.79 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 16 | 0.79 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 16 | 0.79 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 16 | 0.79 |
| (1,3512) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:120:SER:HB3 | 10 | 0.79 |
| (1,3512) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:120:SER:HB3 | 10 | 0.79 |
| (1,3512) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:120:SER:HB3 | 10 | 0.79 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG21 | 11 | 0.79 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG22 | 11 | 0.79 |
| (1,3502) | 1:A:50:SER:HB2 | 1:A:52:VAL:HG23 | 11 | 0.79 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 13 | 0.79 |
| (1,3322) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:159:GLN:HB3 | 11 | 0.79 |
| (1,3322) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:159:GLN:HB3 | 19 | 0.79 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 2 | 0.79 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 10 | 0.79 |
| (1,3056) | 1:A:69:ALA:H | 1:A:121:GLU:HG2 | 9 | 0.79 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 16 | 0.79 |
| (1,3042) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:172:GLY:H | 5 | 0.79 |
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 2 | 0.79 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 3 | 0.79 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 1 | 0.79 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE2 | 19 | 0.79 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE2 | 19 | 0.79 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE2 | 19 | 0.79 |
| (1,2813) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:124:LEU:HD21 | 13 | 0.79 |
| (1,2813) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:124:LEU:HD22 | 13 | 0.79 |
| (1,2813) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:124:LEU:HD23 | 13 | 0.79 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 5 | 0.79 |
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 14 | 0.79 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 12 | 0.79 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD21 | 10 | 0.79 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD22 | 10 | 0.79 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD23 | 10 | 0.79 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD21 | 10 | 0.79 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD22 | 10 | 0.79 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD23 | 10 | 0.79 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD21 | 10 | 0.79 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD22 | 10 | 0.79 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD23 | 10 | 0.79 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:102:GLN:H | 10 | 0.79 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:102:GLN:H | 10 | 0.79 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:102:GLN:H | 10 | 0.79 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 16 | 0.79 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 16 | 0.79 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 16 | 0.79 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG21 | 18 | 0.79 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG22 | 18 | 0.79 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG23 | 18 | 0.79 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG21 | 18 | 0.79 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG22 | 18 | 0.79 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG23 | 18 | 0.79 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG21 | 18 | 0.79 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG22 | 18 | 0.79 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG23 | 18 | 0.79 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 11 | 0.79 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 11 | 0.79 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 11 | 0.79 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 12 | 0.79 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 12 | 0.79 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 12 | 0.79 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE21 | 20 | 0.79 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE21 | 20 | 0.79 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE21 | 20 | 0.79 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE22 | 20 | 0.79 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE22 | 20 | 0.79 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE22 | 20 | 0.79 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:59:ASN:HB3 | 16 | 0.79 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:59:ASN:HB3 | 16 | 0.79 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:59:ASN:HB3 | 16 | 0.79 |
| (1,1820) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:11:HIS:HA | 2 | 0.79 |
| (1,1820) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:11:HIS:HA | 2 | 0.79 |
| (1,1820) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:11:HIS:HA | 2 | 0.79 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 14 | 0.79 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 14 | 0.79 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 14 | 0.79 |
| (1,1745) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 6 | 0.79 |
| (1,1745) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 6 | 0.79 |
| (1,1745) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 6 | 0.79 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 17 | 0.79 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 17 | 0.79 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 17 | 0.79 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD11 | 19 | 0.79 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD12 | 19 | 0.79 |
| (1,1478) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:34:LEU:HD13 | 19 | 0.79 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:H | 2 | 0.79 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:H | 2 | 0.79 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:H | 2 | 0.79 |
| (1,135) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:H | 15 | 0.79 |
| (1,135) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:H | 15 | 0.79 |
| (1,135) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:H | 15 | 0.79 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 8 | 0.79 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 8 | 0.79 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 8 | 0.79 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 3 | 0.78 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 3 | 0.78 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 3 | 0.78 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 7 | 0.78 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 7 | 0.78 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 7 | 0.78 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 10 | 0.78 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 10 | 0.78 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 10 | 0.78 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 12 | 0.78 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 12 | 0.78 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 12 | 0.78 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 6 | 0.78 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 15 | 0.78 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 15 | 0.78 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 15 | 0.78 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG21 | 11 | 0.78 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG22 | 11 | 0.78 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG23 | 11 | 0.78 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 0.78 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 0.78 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD1 | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 0.78 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 0.78 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 0.78 |
| (1,3895) | 1:A:137:TYR:HD2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 0.78 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 13 | 0.78 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 13 | 0.78 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 13 | 0.78 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 13 | 0.78 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 13 | 0.78 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 13 | 0.78 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD1 | 3 | 0.78 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD2 | 3 | 0.78 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD1 | 3 | 0.78 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD2 | 3 | 0.78 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD1 | 3 | 0.78 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD2 | 3 | 0.78 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 14 | 0.78 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 14 | 0.78 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 14 | 0.78 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 9 | 0.78 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 4 | 0.78 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 4 | 0.78 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 4 | 0.78 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 18 | 0.78 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 18 | 0.78 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 18 | 0.78 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 6 | 0.78 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 6 | 0.78 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 6 | 0.78 |
| (1,3322) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:159:GLN:HB3 | 14 | 0.78 |
| (1,331) | 1:A:150:ALA:H | 1:A:178:LYS:HE3 | 16 | 0.78 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 12 | 0.78 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 15 | 0.78 |
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 3 | 0.78 |
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 4 | 0.78 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 12 | 0.78 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 16 | 0.78 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 14 | 0.78 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 14 | 0.78 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 14 | 0.78 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:102:GLN:H | 11 | 0.78 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:102:GLN:H | 11 | 0.78 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:102:GLN:H | 11 | 0.78 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 4 | 0.78 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 4 | 0.78 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 4 | 0.78 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 4 | 0.78 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 4 | 0.78 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 4 | 0.78 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 4 | 0.78 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 4 | 0.78 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 4 | 0.78 |
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 19 | 0.78 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 17 | 0.78 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG21 | 20 | 0.78 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG22 | 20 | 0.78 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG23 | 20 | 0.78 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG21 | 20 | 0.78 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG22 | 20 | 0.78 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG23 | 20 | 0.78 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG21 | 20 | 0.78 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG22 | 20 | 0.78 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG23 | 20 | 0.78 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:173:GLY:HA2 | 9 | 0.78 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:173:GLY:HA2 | 9 | 0.78 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:173:GLY:HA2 | 9 | 0.78 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:59:ASN:HB3 | 14 | 0.78 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:59:ASN:HB3 | 14 | 0.78 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:59:ASN:HB3 | 14 | 0.78 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 16 | 0.78 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 16 | 0.78 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 16 | 0.78 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:73:PHE:HZ | 19 | 0.78 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:73:PHE:HZ | 19 | 0.78 |
| (1,1660) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:73:PHE:HZ | 19 | 0.78 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:HA3 | 20 | 0.78 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:HA3 | 20 | 0.78 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:HA3 | 20 | 0.78 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:H | 7 | 0.78 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:H | 7 | 0.78 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:H | 7 | 0.78 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 4 | 0.78 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 4 | 0.78 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 4 | 0.78 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 4 | 0.78 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 4 | 0.78 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 4 | 0.78 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 4 | 0.78 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 4 | 0.78 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 4 | 0.78 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 0.78 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 0.78 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 0.78 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 0.78 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 0.78 |
| (1,1213) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 0.78 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 8 | 0.77 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 8 | 0.77 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 8 | 0.77 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 9 | 0.77 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 9 | 0.77 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 9 | 0.77 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 14 | 0.77 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 14 | 0.77 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 14 | 0.77 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 15 | 0.77 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 15 | 0.77 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 15 | 0.77 |
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 5 | 0.77 |
| (1,495) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:15:GLU:H | 3 | 0.77 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 6 | 0.77 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 10 | 0.77 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 10 | 0.77 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 10 | 0.77 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 10 | 0.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 10 | 0.77 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 10 | 0.77 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 4 | 0.77 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 10 | 0.77 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 16 | 0.77 |
| (1,3934) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:138:PHE:HZ | 5 | 0.77 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 2 | 0.77 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 2 | 0.77 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 11 | 0.77 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 11 | 0.77 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 11 | 0.77 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 11 | 0.77 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 11 | 0.77 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 11 | 0.77 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 19 | 0.77 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 19 | 0.77 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 15 | 0.77 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 15 | 0.77 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 15 | 0.77 |
| (1,3490) | 1:A:106:ARG:HB3 | 1:A:107:THR:HA | 17 | 0.77 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 16 | 0.77 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:H | 18 | 0.77 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:H | 18 | 0.77 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:H | 18 | 0.77 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG11 | 7 | 0.77 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG12 | 7 | 0.77 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG13 | 7 | 0.77 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG11 | 7 | 0.77 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG12 | 7 | 0.77 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG13 | 7 | 0.77 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 16 | 0.77 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG21 | 12 | 0.77 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG22 | 12 | 0.77 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG23 | 12 | 0.77 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 19 | 0.77 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 19 | 0.77 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 19 | 0.77 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 10 | 0.77 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 10 | 0.77 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 10 | 0.77 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 14 | 0.77 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 14 | 0.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 14 | 0.77 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 11 | 0.77 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 11 | 0.77 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 11 | 0.77 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 6 | 0.77 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 6 | 0.77 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 6 | 0.77 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 6 | 0.77 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 6 | 0.77 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 6 | 0.77 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 6 | 0.77 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 6 | 0.77 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 6 | 0.77 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 12 | 0.77 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 12 | 0.77 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 12 | 0.77 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 12 | 0.77 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 12 | 0.77 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 12 | 0.77 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 12 | 0.77 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 12 | 0.77 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 12 | 0.77 |
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 1 | 0.77 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG21 | 1 | 0.77 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG22 | 1 | 0.77 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG23 | 1 | 0.77 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG21 | 1 | 0.77 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG22 | 1 | 0.77 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG23 | 1 | 0.77 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG21 | 1 | 0.77 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG22 | 1 | 0.77 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG23 | 1 | 0.77 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HA | 15 | 0.77 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HA | 15 | 0.77 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HA | 15 | 0.77 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 2 | 0.77 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:173:GLY:HA2 | 8 | 0.77 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:173:GLY:HA2 | 8 | 0.77 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:173:GLY:HA2 | 8 | 0.77 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 9 | 0.77 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 9 | 0.77 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 9 | 0.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:72:ALA:H | 9 | 0.77 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:72:ALA:H | 9 | 0.77 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:72:ALA:H | 9 | 0.77 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 10 | 0.77 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 10 | 0.77 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 10 | 0.77 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:HA | 18 | 0.77 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:HA | 18 | 0.77 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:HA | 18 | 0.77 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:H | 1 | 0.77 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:H | 1 | 0.77 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:H | 1 | 0.77 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HA | 12 | 0.77 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HA | 12 | 0.77 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HA | 12 | 0.77 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 13 | 0.77 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 13 | 0.77 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 13 | 0.77 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 0.77 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 0.77 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 0.77 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE21 | 8 | 0.77 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE21 | 8 | 0.77 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE21 | 8 | 0.77 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 1 | 0.76 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 1 | 0.76 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 1 | 0.76 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 4 | 0.76 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 4 | 0.76 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 4 | 0.76 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 11 | 0.76 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 11 | 0.76 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 11 | 0.76 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 13 | 0.76 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 13 | 0.76 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 13 | 0.76 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 17 | 0.76 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 17 | 0.76 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 17 | 0.76 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 18 | 0.76 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 18 | 0.76 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 18 | 0.76 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 0.76 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 0.76 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 0.76 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 17 | 0.76 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 17 | 0.76 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 17 | 0.76 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 12 | 0.76 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 12 | 0.76 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 12 | 0.76 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 15 | 0.76 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 16 | 0.76 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 19 | 0.76 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 12 | 0.76 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 17 | 0.76 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 3 | 0.76 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 3 | 0.76 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 3 | 0.76 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 3 | 0.76 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 3 | 0.76 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 3 | 0.76 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 0.76 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 0.76 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 0.76 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 0.76 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 0.76 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 0.76 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 0.76 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 0.76 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 0.76 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 3 | 0.76 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 3 | 0.76 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 3 | 0.76 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 12 | 0.76 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 12 | 0.76 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 12 | 0.76 |
| (1,3322) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:159:GLN:HB3 | 15 | 0.76 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 17 | 0.76 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 17 | 0.76 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 17 | 0.76 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 14 | 0.76 |
| (1,3024) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:159:GLN:HB3 | 6 | 0.76 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 15 | 0.76 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2851) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:130:THR:HA | 7 | 0.76 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 11 | 0.76 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 11 | 0.76 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 11 | 0.76 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 8 | 0.76 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 8 | 0.76 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 8 | 0.76 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 14 | 0.76 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 14 | 0.76 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 14 | 0.76 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 14 | 0.76 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 14 | 0.76 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 14 | 0.76 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 14 | 0.76 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 14 | 0.76 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 14 | 0.76 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HA | 12 | 0.76 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HA | 12 | 0.76 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HA | 12 | 0.76 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 14 | 0.76 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 16 | 0.76 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 16 | 0.76 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 16 | 0.76 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 2 | 0.76 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 2 | 0.76 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 2 | 0.76 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 14 | 0.76 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 14 | 0.76 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 14 | 0.76 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 9 | 0.76 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 9 | 0.76 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 9 | 0.76 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 9 | 0.76 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 9 | 0.76 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 9 | 0.76 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 15 | 0.76 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 15 | 0.76 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 15 | 0.76 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB1 | 14 | 0.76 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB2 | 14 | 0.76 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB3 | 14 | 0.76 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB1 | 14 | 0.76 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB2 | 14 | 0.76 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB3 | 14 | 0.76 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB1 | 14 | 0.76 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB2 | 14 | 0.76 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB3 | 14 | 0.76 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD11 | 9 | 0.76 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD12 | 9 | 0.76 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD13 | 9 | 0.76 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD11 | 20 | 0.76 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD12 | 20 | 0.76 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD13 | 20 | 0.76 |
| (1,1297) | 1:A:120:SER:HA | 1:A:121:GLU:HG3 | 9 | 0.76 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 1 | 0.76 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 1 | 0.76 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 1 | 0.76 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 3 | 0.76 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 3 | 0.76 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 3 | 0.76 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 0.76 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 0.76 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 0.76 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE21 | 20 | 0.76 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE21 | 20 | 0.76 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE21 | 20 | 0.76 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 12 | 0.75 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 12 | 0.75 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 12 | 0.75 |
| (1,732) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:130:THR:H | 9 | 0.75 |
| (1,732) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:130:THR:H | 9 | 0.75 |
| (1,732) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:130:THR:H | 9 | 0.75 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 10 | 0.75 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 4 | 0.75 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 4 | 0.75 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 4 | 0.75 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 13 | 0.75 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 13 | 0.75 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 13 | 0.75 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 13 | 0.75 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 13 | 0.75 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 13 | 0.75 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 1 | 0.75 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 2 | 0.75 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 5 | 0.75 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 6 | 0.75 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 9 | 0.75 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 13 | 0.75 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 18 | 0.75 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 7 | 0.75 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 2 | 0.75 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 2 | 0.75 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 2 | 0.75 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 2 | 0.75 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 2 | 0.75 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 2 | 0.75 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 3 | 0.75 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 3 | 0.75 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 12 | 0.75 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 12 | 0.75 |
| (1,3568) | 1:A:81:GLY:HA3 | 1:A:82:HIS:HB3 | 3 | 0.75 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 15 | 0.75 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 15 | 0.75 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 15 | 0.75 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 20 | 0.75 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 20 | 0.75 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 20 | 0.75 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 11 | 0.75 |
| (1,3322) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:159:GLN:HB3 | 1 | 0.75 |
| (1,3322) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:159:GLN:HB3 | 4 | 0.75 |
| (1,331) | 1:A:150:ALA:H | 1:A:178:LYS:HE3 | 3 | 0.75 |
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 10 | 0.75 |
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 19 | 0.75 |
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 15 | 0.75 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 6 | 0.75 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 20 | 0.75 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 20 | 0.75 |
| (1,2986) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 20 | 0.75 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 6 | 0.75 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 11 | 0.75 |
| (1,2729) | 1:A:14:GLY:HA2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 19 | 0.75 |
| (1,2514) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:19:ALA:HA | 6 | 0.75 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB1 | 12 | 0.75 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB2 | 12 | 0.75 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB3 | 12 | 0.75 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 8 | 0.75 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 6 | 0.75 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 6 | 0.75 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 6 | 0.75 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG21 | 2 | 0.75 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG22 | 2 | 0.75 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG23 | 2 | 0.75 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG21 | 2 | 0.75 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG22 | 2 | 0.75 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG23 | 2 | 0.75 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG21 | 2 | 0.75 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG22 | 2 | 0.75 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG23 | 2 | 0.75 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:H | 14 | 0.75 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:H | 14 | 0.75 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:H | 14 | 0.75 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:H | 19 | 0.75 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:H | 19 | 0.75 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:H | 19 | 0.75 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 13 | 0.75 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:H | 5 | 0.75 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:H | 5 | 0.75 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:H | 5 | 0.75 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:H | 20 | 0.75 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:H | 20 | 0.75 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:H | 20 | 0.75 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 17 | 0.75 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 17 | 0.75 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 17 | 0.75 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 3 | 0.75 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 3 | 0.75 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 3 | 0.75 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 5 | 0.75 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 5 | 0.75 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 5 | 0.75 |
| (1,1975) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HB2 | 13 | 0.75 |
| (1,1975) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HB2 | 13 | 0.75 |
| (1,1975) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HB2 | 13 | 0.75 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:173:GLY:HA2 | 18 | 0.75 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:173:GLY:HA2 | 18 | 0.75 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:173:GLY:HA2 | 18 | 0.75 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:59:ASN:HB3 | 17 | 0.75 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:59:ASN:HB3 | 17 | 0.75 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:59:ASN:HB3 | 17 | 0.75 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 18 | 0.75 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 18 | 0.75 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 18 | 0.75 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 18 | 0.75 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 18 | 0.75 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 18 | 0.75 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:72:ALA:H | 15 | 0.75 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:72:ALA:H | 15 | 0.75 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:72:ALA:H | 15 | 0.75 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD11 | 18 | 0.75 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD12 | 18 | 0.75 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD13 | 18 | 0.75 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:H | 5 | 0.75 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:H | 5 | 0.75 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:H | 5 | 0.75 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:H | 18 | 0.75 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:H | 18 | 0.75 |
| (1,1375) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:H | 18 | 0.75 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 10 | 0.75 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 10 | 0.75 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 10 | 0.75 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 10 | 0.75 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 10 | 0.75 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 10 | 0.75 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 10 | 0.75 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 10 | 0.75 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 10 | 0.75 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:131:ILE:HG13 | 3 | 0.75 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:131:ILE:HG13 | 3 | 0.75 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:131:ILE:HG13 | 3 | 0.75 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 7 | 0.75 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 19 | 0.74 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 19 | 0.74 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 19 | 0.74 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 11 | 0.74 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 12 | 0.74 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 14 | 0.74 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 17 | 0.74 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 20 | 0.74 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 11 | 0.74 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 11 | 0.74 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 19 | 0.74 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 19 | 0.74 |
| (1,3800) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:114:ASP:HB3 | 18 | 0.74 |
| (1,3800) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:114:ASP:HB3 | 18 | 0.74 |
| (1,3800) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:114:ASP:HB3 | 18 | 0.74 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 8 | 0.74 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 8 | 0.74 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 8 | 0.74 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 16 | 0.74 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 16 | 0.74 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 16 | 0.74 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 8 | 0.74 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 8 | 0.74 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 8 | 0.74 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD2 | 5 | 0.74 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD3 | 5 | 0.74 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD2 | 12 | 0.74 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD3 | 12 | 0.74 |
| (1,3322) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:159:GLN:HB3 | 13 | 0.74 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 11 | 0.74 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 11 | 0.74 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 11 | 0.74 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 19 | 0.74 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 19 | 0.74 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 19 | 0.74 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 7 | 0.74 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG11 | 19 | 0.74 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG12 | 19 | 0.74 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG13 | 19 | 0.74 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG11 | 19 | 0.74 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG12 | 19 | 0.74 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG13 | 19 | 0.74 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 2 | 0.74 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE2 | 20 | 0.74 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE2 | 20 | 0.74 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE2 | 20 | 0.74 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:HA3 | 19 | 0.74 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:HA3 | 19 | 0.74 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:HA3 | 19 | 0.74 |
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 8 | 0.74 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 15 | 0.74 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB1 | 1:A:149:ASN:HD21 | 14 | 0.74 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB2 | 1:A:149:ASN:HD21 | 14 | 0.74 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB3 | 1:A:149:ASN:HD21 | 14 | 0.74 |
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 10 | 0.74 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 4 | 0.74 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 4 | 0.74 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 4 | 0.74 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 8 | 0.74 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 8 | 0.74 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 8 | 0.74 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 20 | 0.74 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 20 | 0.74 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 20 | 0.74 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 19 | 0.74 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 2 | 0.74 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 2 | 0.74 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 2 | 0.74 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG11 | 7 | 0.74 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG12 | 7 | 0.74 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG13 | 7 | 0.74 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG21 | 1:A:124:LEU:HD21 | 18 | 0.74 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG21 | 1:A:124:LEU:HD22 | 18 | 0.74 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG21 | 1:A:124:LEU:HD23 | 18 | 0.74 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG22 | 1:A:124:LEU:HD21 | 18 | 0.74 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG22 | 1:A:124:LEU:HD22 | 18 | 0.74 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG22 | 1:A:124:LEU:HD23 | 18 | 0.74 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG23 | 1:A:124:LEU:HD21 | 18 | 0.74 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG23 | 1:A:124:LEU:HD22 | 18 | 0.74 |
| (1,2052) | 1:A:122:THR:HG23 | 1:A:124:LEU:HD23 | 18 | 0.74 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 5 | 0.74 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 5 | 0.74 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 5 | 0.74 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 13 | 0.74 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 13 | 0.74 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 13 | 0.74 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 19 | 0.74 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 19 | 0.74 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 19 | 0.74 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:28:VAL:H | 11 | 0.74 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:28:VAL:H | 11 | 0.74 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:28:VAL:H | 11 | 0.74 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:H | 10 | 0.74 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:H | 10 | 0.74 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:H | 10 | 0.74 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:72:ALA:H | 11 | 0.74 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:72:ALA:H | 11 | 0.74 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:72:ALA:H | 11 | 0.74 |
| (1,1589) | 1:A:111:LEU:HA | 1:A:111:LEU:HD21 | 20 | 0.74 |
| (1,1589) | 1:A:111:LEU:HA | 1:A:111:LEU:HD22 | 20 | 0.74 |
| (1,1589) | 1:A:111:LEU:HA | 1:A:111:LEU:HD23 | 20 | 0.74 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 19 | 0.74 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 19 | 0.74 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 19 | 0.74 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB1 | 4 | 0.74 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB2 | 4 | 0.74 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB3 | 4 | 0.74 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB1 | 4 | 0.74 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB2 | 4 | 0.74 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB3 | 4 | 0.74 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB1 | 4 | 0.74 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB2 | 4 | 0.74 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB3 | 4 | 0.74 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 5 | 0.74 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 5 | 0.74 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 5 | 0.74 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 5 | 0.74 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 5 | 0.74 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 5 | 0.74 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 5 | 0.74 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 5 | 0.74 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 5 | 0.74 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB1 | 5 | 0.74 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB2 | 5 | 0.74 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB3 | 5 | 0.74 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB1 | 5 | 0.74 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB2 | 5 | 0.74 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB3 | 5 | 0.74 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB1 | 5 | 0.74 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB2 | 5 | 0.74 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB3 | 5 | 0.74 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:131:ILE:HG13 | 7 | 0.74 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:131:ILE:HG13 | 7 | 0.74 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:131:ILE:HG13 | 7 | 0.74 |
| (1,942) | 1:A:24:ASP:HB2 | 1:A:27:SER:H | 18 | 0.73 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 10 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 10 | 0.73 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 10 | 0.73 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 19 | 0.73 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 19 | 0.73 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 19 | 0.73 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 10 | 0.73 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 10 | 0.73 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 10 | 0.73 |
| (1,495) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:15:GLU:H | 9 | 0.73 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 3 | 0.73 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 3 | 0.73 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 3 | 0.73 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 3 | 0.73 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 3 | 0.73 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 3 | 0.73 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 8 | 0.73 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 6 | 0.73 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 6 | 0.73 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 6 | 0.73 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 6 | 0.73 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 6 | 0.73 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 6 | 0.73 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 1 | 0.73 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 1 | 0.73 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 1 | 0.73 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 2 | 0.73 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 2 | 0.73 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 2 | 0.73 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 8 | 0.73 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 8 | 0.73 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 8 | 0.73 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 17 | 0.73 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 17 | 0.73 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 17 | 0.73 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 18 | 0.73 |
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 8 | 0.73 |
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 13 | 0.73 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 15 | 0.73 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 13 | 0.73 |
| (1,2860) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:119:SER:HB3 | 2 | 0.73 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB3 | 16 | 0.73 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB3 | 16 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB3 | 16 | 0.73 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG21 | 5 | 0.73 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG22 | 5 | 0.73 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG23 | 5 | 0.73 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:HA3 | 9 | 0.73 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:HA3 | 9 | 0.73 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:HA3 | 9 | 0.73 |
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 12 | 0.73 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB1 | 6 | 0.73 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB2 | 6 | 0.73 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB3 | 6 | 0.73 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB1 | 7 | 0.73 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB2 | 7 | 0.73 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB3 | 7 | 0.73 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 15 | 0.73 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 15 | 0.73 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 15 | 0.73 |
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 11 | 0.73 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG11 | 13 | 0.73 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG12 | 13 | 0.73 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG13 | 13 | 0.73 |
| (1,1951) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HG2 | 20 | 0.73 |
| (1,1951) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HG2 | 20 | 0.73 |
| (1,1951) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HG2 | 20 | 0.73 |
| (1,1845) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:29:ASP:HB2 | 20 | 0.73 |
| (1,1845) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:29:ASP:HB2 | 20 | 0.73 |
| (1,1845) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:29:ASP:HB2 | 20 | 0.73 |
| (1,1845) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:29:ASP:HB3 | 20 | 0.73 |
| (1,1845) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:29:ASP:HB3 | 20 | 0.73 |
| (1,1845) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:29:ASP:HB3 | 20 | 0.73 |
| (1,1833) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:59:ASN:HD22 | 1 | 0.73 |
| (1,1833) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:59:ASN:HD22 | 1 | 0.73 |
| (1,1833) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:59:ASN:HD22 | 1 | 0.73 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 5 | 0.73 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 5 | 0.73 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 5 | 0.73 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 8 | 0.73 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 8 | 0.73 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 8 | 0.73 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:28:VAL:H | 10 | 0.73 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:28:VAL:H | 10 | 0.73 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:28:VAL:H | 10 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 9 | 0.73 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 9 | 0.73 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 9 | 0.73 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:149:ASN:HA | 8 | 0.73 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:149:ASN:HA | 8 | 0.73 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:149:ASN:HA | 8 | 0.73 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD11 | 1 | 0.73 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD12 | 1 | 0.73 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD13 | 1 | 0.73 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD11 | 2 | 0.73 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD12 | 2 | 0.73 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD13 | 2 | 0.73 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD11 | 4 | 0.73 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD12 | 4 | 0.73 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD13 | 4 | 0.73 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD11 | 16 | 0.73 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD12 | 16 | 0.73 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD13 | 16 | 0.73 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:HA3 | 9 | 0.73 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:HA3 | 9 | 0.73 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:HA3 | 9 | 0.73 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 3 | 0.73 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 3 | 0.73 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 3 | 0.73 |
| (1,1467) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:LYS:HG2 | 14 | 0.73 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE22 | 1 | 0.73 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE22 | 1 | 0.73 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE22 | 1 | 0.73 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:H | 16 | 0.73 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:H | 16 | 0.73 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:H | 16 | 0.73 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB1 | 3 | 0.73 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB2 | 3 | 0.73 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB3 | 3 | 0.73 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB1 | 3 | 0.73 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB2 | 3 | 0.73 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB3 | 3 | 0.73 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB1 | 3 | 0.73 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB2 | 3 | 0.73 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB3 | 3 | 0.73 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB1 | 7 | 0.73 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB2 | 7 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB3 | 7 | 0.73 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB1 | 7 | 0.73 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB2 | 7 | 0.73 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB3 | 7 | 0.73 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB1 | 7 | 0.73 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB2 | 7 | 0.73 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB3 | 7 | 0.73 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 14 | 0.73 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 14 | 0.73 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 14 | 0.73 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 14 | 0.73 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 14 | 0.73 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 14 | 0.73 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 14 | 0.73 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 14 | 0.73 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 14 | 0.73 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 18 | 0.73 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 18 | 0.73 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 18 | 0.73 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 18 | 0.73 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 18 | 0.73 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 18 | 0.73 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:57:GLN:H | 11 | 0.72 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:57:GLN:H | 11 | 0.72 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:57:GLN:H | 11 | 0.72 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 17 | 0.72 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 17 | 0.72 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 17 | 0.72 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 17 | 0.72 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 17 | 0.72 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 17 | 0.72 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 4 | 0.72 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 7 | 0.72 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 10 | 0.72 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 20 | 0.72 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 14 | 0.72 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE1 | 11 | 0.72 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE2 | 11 | 0.72 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 19 | 0.72 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 19 | 0.72 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 1 | 0.72 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 1 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 1 | 0.72 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 1 | 0.72 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 1 | 0.72 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 1 | 0.72 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 10 | 0.72 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 10 | 0.72 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 10 | 0.72 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 13 | 0.72 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 13 | 0.72 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 13 | 0.72 |
| (1,3483) | 1:A:68:LYS:HD3 | 1:A:121:GLU:HG2 | 9 | 0.72 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 10 | 0.72 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 10 | 0.72 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 10 | 0.72 |
| (1,3407) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HB3 | 19 | 0.72 |
| (1,3322) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:159:GLN:HB3 | 5 | 0.72 |
| (1,3056) | 1:A:69:ALA:H | 1:A:121:GLU:HG2 | 10 | 0.72 |
| (1,3024) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:159:GLN:HB3 | 16 | 0.72 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 14 | 0.72 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 14 | 0.72 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 14 | 0.72 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 16 | 0.72 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 16 | 0.72 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 16 | 0.72 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 15 | 0.72 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 15 | 0.72 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 15 | 0.72 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB1 | 2 | 0.72 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB2 | 2 | 0.72 |
| (1,2430) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ALA:HB3 | 2 | 0.72 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 10 | 0.72 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 10 | 0.72 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 10 | 0.72 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 10 | 0.72 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 10 | 0.72 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 10 | 0.72 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 10 | 0.72 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 10 | 0.72 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 10 | 0.72 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 15 | 0.72 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 15 | 0.72 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 15 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 15 | 0.72 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 15 | 0.72 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 15 | 0.72 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 15 | 0.72 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 15 | 0.72 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 15 | 0.72 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HA | 10 | 0.72 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HA | 10 | 0.72 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HA | 10 | 0.72 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:H | 18 | 0.72 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:H | 18 | 0.72 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:H | 18 | 0.72 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG11 | 20 | 0.72 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG12 | 20 | 0.72 |
| (1,2082) | 1:A:82:HIS:HA | 1:A:85:VAL:HG13 | 20 | 0.72 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:H | 9 | 0.72 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:H | 9 | 0.72 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:H | 9 | 0.72 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:H | 14 | 0.72 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:H | 14 | 0.72 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:H | 14 | 0.72 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:H | 16 | 0.72 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:H | 16 | 0.72 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:H | 16 | 0.72 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:H | 17 | 0.72 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:H | 17 | 0.72 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:H | 17 | 0.72 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:H | 19 | 0.72 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:H | 19 | 0.72 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:H | 19 | 0.72 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 20 | 0.72 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 20 | 0.72 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 20 | 0.72 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG21 | 9 | 0.72 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG22 | 9 | 0.72 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG23 | 9 | 0.72 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG21 | 9 | 0.72 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG22 | 9 | 0.72 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG23 | 9 | 0.72 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG21 | 9 | 0.72 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG22 | 9 | 0.72 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG23 | 9 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:59:ASN:H | 11 | 0.72 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:59:ASN:H | 11 | 0.72 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:59:ASN:H | 11 | 0.72 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 9 | 0.72 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 9 | 0.72 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 9 | 0.72 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 9 | 0.72 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 9 | 0.72 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 9 | 0.72 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 9 | 0.72 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 9 | 0.72 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 9 | 0.72 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 3 | 0.72 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 3 | 0.72 |
| (1,1678) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 3 | 0.72 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD11 | 11 | 0.72 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD12 | 11 | 0.72 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD13 | 11 | 0.72 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD11 | 13 | 0.72 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD12 | 13 | 0.72 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD13 | 13 | 0.72 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD11 | 15 | 0.72 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD12 | 15 | 0.72 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD13 | 15 | 0.72 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB1 | 15 | 0.72 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB2 | 15 | 0.72 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB3 | 15 | 0.72 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB1 | 15 | 0.72 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB2 | 15 | 0.72 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB3 | 15 | 0.72 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB1 | 15 | 0.72 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB2 | 15 | 0.72 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB3 | 15 | 0.72 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 11 | 0.72 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 11 | 0.72 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 11 | 0.72 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 11 | 0.72 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 11 | 0.72 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 11 | 0.72 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 11 | 0.72 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 11 | 0.72 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 11 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:124:LEU:HD11 | 13 | 0.72 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:124:LEU:HD12 | 13 | 0.72 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:124:LEU:HD13 | 13 | 0.72 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:124:LEU:HD11 | 13 | 0.72 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:124:LEU:HD12 | 13 | 0.72 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:124:LEU:HD13 | 13 | 0.72 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:124:LEU:HD11 | 13 | 0.72 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:124:LEU:HD12 | 13 | 0.72 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:124:LEU:HD13 | 13 | 0.72 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 11 | 0.72 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 11 | 0.72 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 11 | 0.72 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 11 | 0.72 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 11 | 0.72 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 11 | 0.72 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB2 | 1 | 0.72 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB2 | 1 | 0.72 |
| (1,1266) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB2 | 1 | 0.72 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 0.72 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 0.72 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 0.72 |
| (1,857) | 1:A:49:SER:H | 1:A:136:ARG:HD3 | 9 | 0.71 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 16 | 0.71 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 16 | 0.71 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 16 | 0.71 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 16 | 0.71 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 16 | 0.71 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 16 | 0.71 |
| (1,3969) | 1:A:11:HIS:HB2 | 1:A:11:HIS:HD2 | 9 | 0.71 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 18 | 0.71 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 18 | 0.71 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 18 | 0.71 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 18 | 0.71 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 18 | 0.71 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 18 | 0.71 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 19 | 0.71 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 19 | 0.71 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 19 | 0.71 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 19 | 0.71 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 19 | 0.71 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 19 | 0.71 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 17 | 0.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 17 | 0.71 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 9 | 0.71 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 9 | 0.71 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 9 | 0.71 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 0.71 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 0.71 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 0.71 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 0.71 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 0.71 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 0.71 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 0.71 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 0.71 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 0.71 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 18 | 0.71 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 18 | 0.71 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 18 | 0.71 |
| (1,3322) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:159:GLN:HB3 | 20 | 0.71 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 13 | 0.71 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 13 | 0.71 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 13 | 0.71 |
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 7 | 0.71 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 19 | 0.71 |
| (1,3242) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HB | 4 | 0.71 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 3 | 0.71 |
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 14 | 0.71 |
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 12 | 0.71 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 18 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 4 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 4 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 4 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 5 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 5 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 5 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 6 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 6 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 6 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 8 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 8 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 8 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 10 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 10 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 10 | 0.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 15 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 15 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 15 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 20 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 20 | 0.71 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 20 | 0.71 |
| (1,2677) | 1:A:28:VAL:HB | 1:A:173:GLY:HA2 | 16 | 0.71 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 6 | 0.71 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 6 | 0.71 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 6 | 0.71 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 11 | 0.71 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 11 | 0.71 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 11 | 0.71 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 1 | 0.71 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 1 | 0.71 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 1 | 0.71 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 1 | 0.71 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 1 | 0.71 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 1 | 0.71 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 1 | 0.71 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 1 | 0.71 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 1 | 0.71 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 11 | 0.71 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 18 | 0.71 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 18 | 0.71 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 18 | 0.71 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:H | 13 | 0.71 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:H | 13 | 0.71 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:H | 13 | 0.71 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 6 | 0.71 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 6 | 0.71 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 6 | 0.71 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 20 | 0.71 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 20 | 0.71 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 20 | 0.71 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:H | 13 | 0.71 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:H | 13 | 0.71 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:H | 13 | 0.71 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 7 | 0.71 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 7 | 0.71 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 7 | 0.71 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 8 | 0.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 8 | 0.71 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 8 | 0.71 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 15 | 0.71 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 15 | 0.71 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 15 | 0.71 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 1 | 0.71 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 1 | 0.71 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 1 | 0.71 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 15 | 0.71 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 15 | 0.71 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 15 | 0.71 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 18 | 0.71 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 18 | 0.71 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 18 | 0.71 |
| (1,1588) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:119:SER:HA | 10 | 0.71 |
| (1,1588) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:119:SER:HA | 10 | 0.71 |
| (1,1588) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:119:SER:HA | 10 | 0.71 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB1 | 1 | 0.71 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB2 | 1 | 0.71 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB3 | 1 | 0.71 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB1 | 1 | 0.71 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB2 | 1 | 0.71 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB3 | 1 | 0.71 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB1 | 1 | 0.71 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB2 | 1 | 0.71 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB3 | 1 | 0.71 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HA | 10 | 0.71 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HA | 10 | 0.71 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HA | 10 | 0.71 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 7 | 0.71 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 7 | 0.71 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 7 | 0.71 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 7 | 0.71 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 7 | 0.71 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 7 | 0.71 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 10 | 0.71 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 10 | 0.71 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 10 | 0.71 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 10 | 0.71 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 10 | 0.71 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 10 | 0.71 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 0.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 0.71 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 0.71 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 17 | 0.71 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 4 | 0.7 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 4 | 0.7 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 4 | 0.7 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 19 | 0.7 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 19 | 0.7 |
| (1,936) | 1:A:27:SER:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 19 | 0.7 |
| (1,851) | 1:A:63:THR:H | 1:A:64:ASN:HB3 | 20 | 0.7 |
| (1,498) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:170:VAL:H | 1 | 0.7 |
| (1,442) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:160:GLY:HA3 | 7 | 0.7 |
| (1,3969) | 1:A:11:HIS:HB2 | 1:A:11:HIS:HD2 | 5 | 0.7 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG21 | 17 | 0.7 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG22 | 17 | 0.7 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG23 | 17 | 0.7 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 6 | 0.7 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 6 | 0.7 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 6 | 0.7 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 6 | 0.7 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 6 | 0.7 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 6 | 0.7 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 17 | 0.7 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 17 | 0.7 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 7 | 0.7 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 7 | 0.7 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 7 | 0.7 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 7 | 0.7 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 7 | 0.7 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 7 | 0.7 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 0.7 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 0.7 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 0.7 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 0.7 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 0.7 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 0.7 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 0.7 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 0.7 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 0.7 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 0.7 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 0.7 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 0.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 0.7 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 0.7 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 0.7 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 5 | 0.7 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 5 | 0.7 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 5 | 0.7 |
| (1,3323) | 1:A:119:SER:HB3 | 1:A:120:SER:HB2 | 12 | 0.7 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 17 | 0.7 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 17 | 0.7 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 17 | 0.7 |
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 11 | 0.7 |
| (1,3273) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:159:GLN:HG2 | 8 | 0.7 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 11 | 0.7 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 11 | 0.7 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 11 | 0.7 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 19 | 0.7 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 13 | 0.7 |
| (1,3024) | 1:A:68:LYS:HB2 | 1:A:159:GLN:HB3 | 3 | 0.7 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 20 | 0.7 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 4 | 0.7 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 12 | 0.7 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 2 | 0.7 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 2 | 0.7 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 2 | 0.7 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 13 | 0.7 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 13 | 0.7 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 13 | 0.7 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:HA3 | 14 | 0.7 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:HA3 | 14 | 0.7 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:HA3 | 14 | 0.7 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB1 | 14 | 0.7 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB2 | 14 | 0.7 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB3 | 14 | 0.7 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 17 | 0.7 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 17 | 0.7 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 17 | 0.7 |
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 5 | 0.7 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG21 | 17 | 0.7 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG22 | 17 | 0.7 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG23 | 17 | 0.7 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG21 | 17 | 0.7 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG22 | 17 | 0.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG23 | 17 | 0.7 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG21 | 17 | 0.7 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG22 | 17 | 0.7 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG23 | 17 | 0.7 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:H | 6 | 0.7 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:H | 6 | 0.7 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:H | 6 | 0.7 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 4 | 0.7 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 4 | 0.7 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 4 | 0.7 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 4 | 0.7 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 4 | 0.7 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 4 | 0.7 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG21 | 17 | 0.7 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG22 | 17 | 0.7 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG23 | 17 | 0.7 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG21 | 17 | 0.7 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG22 | 17 | 0.7 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG23 | 17 | 0.7 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG21 | 17 | 0.7 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG22 | 17 | 0.7 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG23 | 17 | 0.7 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 9 | 0.7 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 9 | 0.7 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 9 | 0.7 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB1 | 5 | 0.7 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB2 | 5 | 0.7 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB3 | 5 | 0.7 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB1 | 5 | 0.7 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB2 | 5 | 0.7 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB3 | 5 | 0.7 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB1 | 5 | 0.7 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB2 | 5 | 0.7 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB3 | 5 | 0.7 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD11 | 5 | 0.7 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD12 | 5 | 0.7 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD13 | 5 | 0.7 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD11 | 8 | 0.7 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD12 | 8 | 0.7 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD13 | 8 | 0.7 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD11 | 10 | 0.7 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD12 | 10 | 0.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD13 | 10 | 0.7 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:HA3 | 3 | 0.7 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:HA3 | 3 | 0.7 |
| (1,1532) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:HA3 | 3 | 0.7 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 6 | 0.7 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 6 | 0.7 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 6 | 0.7 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 6 | 0.7 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 6 | 0.7 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 6 | 0.7 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 6 | 0.7 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 6 | 0.7 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 6 | 0.7 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HA | 8 | 0.7 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HA | 8 | 0.7 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HA | 8 | 0.7 |
| (1,1310) | 1:A:67:SER:HA | 1:A:124:LEU:HD11 | 15 | 0.7 |
| (1,1310) | 1:A:67:SER:HA | 1:A:124:LEU:HD12 | 15 | 0.7 |
| (1,1310) | 1:A:67:SER:HA | 1:A:124:LEU:HD13 | 15 | 0.7 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:H | 8 | 0.69 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:H | 8 | 0.69 |
| (1,945) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:H | 8 | 0.69 |
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 12 | 0.69 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:57:GLN:H | 7 | 0.69 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:57:GLN:H | 7 | 0.69 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:57:GLN:H | 7 | 0.69 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:H | 18 | 0.69 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:H | 18 | 0.69 |
| (1,401) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:H | 18 | 0.69 |
| (1,3969) | 1:A:11:HIS:HB2 | 1:A:11:HIS:HD2 | 1 | 0.69 |
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 5 | 0.69 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 14 | 0.69 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 14 | 0.69 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 14 | 0.69 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 14 | 0.69 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 14 | 0.69 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 14 | 0.69 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 17 | 0.69 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 17 | 0.69 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 17 | 0.69 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 17 | 0.69 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 17 | 0.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 17 | 0.69 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 13 | 0.69 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 13 | 0.69 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 13 | 0.69 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 13 | 0.69 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 13 | 0.69 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 13 | 0.69 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 19 | 0.69 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 19 | 0.69 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 19 | 0.69 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 0.69 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 0.69 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 0.69 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG13 | 3 | 0.69 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG13 | 3 | 0.69 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG13 | 3 | 0.69 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 0.69 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 0.69 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 0.69 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 0.69 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 0.69 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 0.69 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 0.69 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 0.69 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 0.69 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.69 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.69 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.69 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.69 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.69 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.69 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.69 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.69 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.69 |
| (1,3564) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HA | 17 | 0.69 |
| (1,3322) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:159:GLN:HB3 | 8 | 0.69 |
| (1,3273) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:159:GLN:HG2 | 14 | 0.69 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 20 | 0.69 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 18 | 0.69 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 18 | 0.69 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 18 | 0.69 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 11 | 0.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG11 | 17 | 0.69 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG12 | 17 | 0.69 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG13 | 17 | 0.69 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG11 | 17 | 0.69 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG12 | 17 | 0.69 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG13 | 17 | 0.69 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 17 | 0.69 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 17 | 0.69 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 17 | 0.69 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 19 | 0.69 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 19 | 0.69 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 19 | 0.69 |
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 16 | 0.69 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 16 | 0.69 |
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 17 | 0.69 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 14 | 0.69 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 14 | 0.69 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 14 | 0.69 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG21 | 20 | 0.69 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG22 | 20 | 0.69 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG23 | 20 | 0.69 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG21 | 20 | 0.69 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG22 | 20 | 0.69 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG23 | 20 | 0.69 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG21 | 20 | 0.69 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG22 | 20 | 0.69 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG23 | 20 | 0.69 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 2 | 0.69 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 2 | 0.69 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 2 | 0.69 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 2 | 0.69 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 2 | 0.69 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 2 | 0.69 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 2 | 0.69 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 2 | 0.69 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 2 | 0.69 |
| (1,1720) | 1:A:24:ASP:HA | 1:A:59:ASN:HB2 | 11 | 0.69 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:72:ALA:H | 4 | 0.69 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:72:ALA:H | 4 | 0.69 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:72:ALA:H | 4 | 0.69 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:72:ALA:H | 5 | 0.69 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:72:ALA:H | 5 | 0.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:72:ALA:H | 5 | 0.69 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 19 | 0.69 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 19 | 0.69 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 19 | 0.69 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:149:ASN:HA | 11 | 0.69 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:149:ASN:HA | 11 | 0.69 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:149:ASN:HA | 11 | 0.69 |
| (1,1595) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:120:SER:H | 18 | 0.69 |
| (1,1595) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:120:SER:H | 18 | 0.69 |
| (1,1595) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:120:SER:H | 18 | 0.69 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 16 | 0.69 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 16 | 0.69 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 16 | 0.69 |
| (1,149) | 1:A:123:THR:H | 1:A:124:LEU:HD21 | 10 | 0.69 |
| (1,149) | 1:A:123:THR:H | 1:A:124:LEU:HD22 | 10 | 0.69 |
| (1,149) | 1:A:123:THR:H | 1:A:124:LEU:HD23 | 10 | 0.69 |
| (1,1365) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD21 | 12 | 0.69 |
| (1,1365) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD22 | 12 | 0.69 |
| (1,1365) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD23 | 12 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 2 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 2 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 2 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 2 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 2 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 2 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 2 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 2 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 2 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 3 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 3 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 3 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 3 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 3 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 3 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 3 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 3 | 0.69 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 3 | 0.69 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 0.68 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 0.68 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 0.68 |
| (1,498) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:170:VAL:H | 18 | 0.68 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 3 | 0.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 3 | 0.68 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 3 | 0.68 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 20 | 0.68 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 20 | 0.68 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 20 | 0.68 |
| (1,3971) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:82:HIS:HD2 | 3 | 0.68 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 3 | 0.68 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 3 | 0.68 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 3 | 0.68 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 3 | 0.68 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 3 | 0.68 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 3 | 0.68 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 16 | 0.68 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 16 | 0.68 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 16 | 0.68 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 16 | 0.68 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 16 | 0.68 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 16 | 0.68 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 14 | 0.68 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 14 | 0.68 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 6 | 0.68 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 6 | 0.68 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 4 | 0.68 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 4 | 0.68 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 4 | 0.68 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 4 | 0.68 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 4 | 0.68 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 4 | 0.68 |
| (1,3785) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:75:GLY:HA3 | 18 | 0.68 |
| (1,3785) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:75:GLY:HA3 | 18 | 0.68 |
| (1,3785) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:75:GLY:HA3 | 18 | 0.68 |
| (1,3778) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HB | 1 | 0.68 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG11 | 16 | 0.68 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG12 | 16 | 0.68 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG13 | 16 | 0.68 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG13 | 2 | 0.68 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG13 | 2 | 0.68 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG13 | 2 | 0.68 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 10 | 0.68 |
| (1,3564) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HA | 5 | 0.68 |
| (1,3527) | 1:A:176:HIS:HB2 | 1:A:178:LYS:HE2 | 19 | 0.68 |
| (1,3322) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:159:GLN:HB3 | 12 | 0.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,3283) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:159:GLN:HG3 | 19 | 0.68 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 7 | 0.68 |
| (1,293) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:65:VAL:HG11 | 5 | 0.68 |
| (1,293) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:65:VAL:HG12 | 5 | 0.68 |
| (1,293) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:65:VAL:HG13 | 5 | 0.68 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 1 | 0.68 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 1 | 0.68 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 1 | 0.68 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 3 | 0.68 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 3 | 0.68 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 3 | 0.68 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:HA3 | 13 | 0.68 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:HA3 | 13 | 0.68 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:HA3 | 13 | 0.68 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG21 | 6 | 0.68 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG22 | 6 | 0.68 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG23 | 6 | 0.68 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG21 | 10 | 0.68 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG22 | 10 | 0.68 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG23 | 10 | 0.68 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 20 | 0.68 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 20 | 0.68 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 20 | 0.68 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 5 | 0.68 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 18 | 0.68 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 18 | 0.68 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 18 | 0.68 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 9 | 0.68 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 9 | 0.68 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 9 | 0.68 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 17 | 0.68 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 17 | 0.68 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 17 | 0.68 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG21 | 1 | 0.68 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG22 | 1 | 0.68 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG23 | 1 | 0.68 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG21 | 1 | 0.68 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG22 | 1 | 0.68 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG23 | 1 | 0.68 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG21 | 1 | 0.68 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG22 | 1 | 0.68 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG23 | 1 | 0.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 10 | 0.68 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 10 | 0.68 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 10 | 0.68 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 4 | 0.68 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 4 | 0.68 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 4 | 0.68 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB3 | 16 | 0.68 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB3 | 16 | 0.68 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB3 | 16 | 0.68 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:28:VAL:H | 5 | 0.68 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:28:VAL:H | 5 | 0.68 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:28:VAL:H | 5 | 0.68 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:149:ASN:HA | 13 | 0.68 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:149:ASN:HA | 13 | 0.68 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:149:ASN:HA | 13 | 0.68 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD11 | 3 | 0.68 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD12 | 3 | 0.68 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD13 | 3 | 0.68 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD11 | 7 | 0.68 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD12 | 7 | 0.68 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD13 | 7 | 0.68 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 11 | 0.68 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 11 | 0.68 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 11 | 0.68 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 11 | 0.68 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 11 | 0.68 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 11 | 0.68 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 11 | 0.68 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 11 | 0.68 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 11 | 0.68 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:131:ILE:HG13 | 19 | 0.68 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:131:ILE:HG13 | 19 | 0.68 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:131:ILE:HG13 | 19 | 0.68 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 0.67 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 0.67 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 0.67 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 14 | 0.67 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG21 | 4 | 0.67 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG22 | 4 | 0.67 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG23 | 4 | 0.67 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 8 | 0.67 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 8 | 0.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 8 | 0.67 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 8 | 0.67 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 8 | 0.67 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 8 | 0.67 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 11 | 0.67 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 11 | 0.67 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 11 | 0.67 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 11 | 0.67 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 11 | 0.67 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 11 | 0.67 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 13 | 0.67 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 13 | 0.67 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 13 | 0.67 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 13 | 0.67 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 13 | 0.67 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 13 | 0.67 |
| (1,3564) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HA | 1 | 0.67 |
| (1,3564) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HA | 9 | 0.67 |
| (1,3564) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HA | 10 | 0.67 |
| (1,3564) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HA | 19 | 0.67 |
| (1,3564) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HA | 20 | 0.67 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 5 | 0.67 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 5 | 0.67 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 5 | 0.67 |
| (1,3505) | 1:A:106:ARG:HB2 | 1:A:132:PRO:HG2 | 7 | 0.67 |
| (1,3505) | 1:A:106:ARG:HB2 | 1:A:132:PRO:HG3 | 7 | 0.67 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 7 | 0.67 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 7 | 0.67 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 7 | 0.67 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB2 | 10 | 0.67 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB2 | 10 | 0.67 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB2 | 10 | 0.67 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 2 | 0.67 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 2 | 0.67 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 2 | 0.67 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 7 | 0.67 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 7 | 0.67 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 7 | 0.67 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 20 | 0.67 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 20 | 0.67 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 20 | 0.67 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 4 | 0.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 18 | 0.67 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HB | 5 | 0.67 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HB | 5 | 0.67 |
| (1,3039) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HB | 5 | 0.67 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:H | 7 | 0.67 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:H | 7 | 0.67 |
| (1,297) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:H | 7 | 0.67 |
| (1,2867) | 1:A:149:ASN:HB3 | 1:A:178:LYS:HE3 | 9 | 0.67 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 8 | 0.67 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG21 | 2 | 0.67 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG22 | 2 | 0.67 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG23 | 2 | 0.67 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 2 | 0.67 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 2 | 0.67 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 2 | 0.67 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 7 | 0.67 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 7 | 0.67 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 7 | 0.67 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB1 | 1:A:149:ASN:HD21 | 6 | 0.67 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB2 | 1:A:149:ASN:HD21 | 6 | 0.67 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB3 | 1:A:149:ASN:HD21 | 6 | 0.67 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 9 | 0.67 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 9 | 0.67 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 9 | 0.67 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 9 | 0.67 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 9 | 0.67 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 9 | 0.67 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 9 | 0.67 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 9 | 0.67 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 9 | 0.67 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 9 | 0.67 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 13 | 0.67 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 13 | 0.67 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 13 | 0.67 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG11 | 5 | 0.67 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG12 | 5 | 0.67 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG13 | 5 | 0.67 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 8 | 0.67 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 8 | 0.67 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 8 | 0.67 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 1 | 0.67 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 1 | 0.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 1 | 0.67 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 5 | 0.67 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 5 | 0.67 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 5 | 0.67 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 19 | 0.67 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 19 | 0.67 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 19 | 0.67 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 6 | 0.67 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 6 | 0.67 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 6 | 0.67 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 16 | 0.67 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 16 | 0.67 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 16 | 0.67 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 19 | 0.67 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 19 | 0.67 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 19 | 0.67 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 16 | 0.67 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 16 | 0.67 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 16 | 0.67 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 16 | 0.67 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 16 | 0.67 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 16 | 0.67 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 16 | 0.67 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 16 | 0.67 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 16 | 0.67 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:149:ASN:HA | 3 | 0.67 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:149:ASN:HA | 3 | 0.67 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:149:ASN:HA | 3 | 0.67 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 0.67 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 0.67 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 0.67 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 0.67 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 0.67 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 0.67 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 0.67 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 0.67 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 0.67 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 11 | 0.67 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 11 | 0.67 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 11 | 0.67 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:ASN:H | 14 | 0.67 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:ASN:H | 14 | 0.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:ASN:H | 14 | 0.67 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:H | 3 | 0.67 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:H | 3 | 0.67 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:H | 3 | 0.67 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:H | 9 | 0.67 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:H | 9 | 0.67 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:H | 9 | 0.67 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:H | 10 | 0.67 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:H | 10 | 0.67 |
| (1,1227) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:H | 10 | 0.67 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 15 | 0.67 |
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 4 | 0.66 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 12 | 0.66 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 12 | 0.66 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 12 | 0.66 |
| (1,3969) | 1:A:11:HIS:HB2 | 1:A:11:HIS:HD2 | 2 | 0.66 |
| (1,3969) | 1:A:11:HIS:HB2 | 1:A:11:HIS:HD2 | 20 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 2 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 2 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 2 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 2 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 2 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 2 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 5 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 5 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 5 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 5 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 5 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 5 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 7 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 7 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 7 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 7 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 7 | 0.66 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 7 | 0.66 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE1 | 19 | 0.66 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE2 | 19 | 0.66 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 13 | 0.66 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 13 | 0.66 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 20 | 0.66 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 20 | 0.66 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 0.66 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 0.66 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 0.66 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 0.66 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 0.66 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 0.66 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 0.66 |
| (1,3564) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HA | 6 | 0.66 |
| (1,3564) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HA | 8 | 0.66 |
| (1,3564) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HA | 15 | 0.66 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 4 | 0.66 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 4 | 0.66 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 4 | 0.66 |
| (1,3322) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:159:GLN:HB3 | 3 | 0.66 |
| (1,3322) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:159:GLN:HB3 | 9 | 0.66 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 5 | 0.66 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 5 | 0.66 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 5 | 0.66 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 14 | 0.66 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 14 | 0.66 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 14 | 0.66 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 16 | 0.66 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 16 | 0.66 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 16 | 0.66 |
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 17 | 0.66 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD11 | 16 | 0.66 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD12 | 16 | 0.66 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD13 | 16 | 0.66 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 19 | 0.66 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG21 | 11 | 0.66 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG22 | 11 | 0.66 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG23 | 11 | 0.66 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 14 | 0.66 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 1 | 0.66 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 1 | 0.66 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 1 | 0.66 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:102:GLN:H | 5 | 0.66 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:102:GLN:H | 5 | 0.66 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:102:GLN:H | 5 | 0.66 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG11 | 6 | 0.66 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG12 | 6 | 0.66 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG13 | 6 | 0.66 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 13 | 0.66 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 13 | 0.66 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 13 | 0.66 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 20 | 0.66 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 20 | 0.66 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 20 | 0.66 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 8 | 0.66 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 8 | 0.66 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 8 | 0.66 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 13 | 0.66 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 13 | 0.66 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 13 | 0.66 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 13 | 0.66 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 13 | 0.66 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 13 | 0.66 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:28:VAL:H | 2 | 0.66 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:28:VAL:H | 2 | 0.66 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:28:VAL:H | 2 | 0.66 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 7 | 0.66 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 7 | 0.66 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 7 | 0.66 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 12 | 0.66 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 12 | 0.66 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 12 | 0.66 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 14 | 0.66 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 14 | 0.66 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 14 | 0.66 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 20 | 0.66 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 20 | 0.66 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 20 | 0.66 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:149:ASN:HA | 17 | 0.66 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:149:ASN:HA | 17 | 0.66 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:149:ASN:HA | 17 | 0.66 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:149:ASN:HA | 19 | 0.66 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:149:ASN:HA | 19 | 0.66 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:149:ASN:HA | 19 | 0.66 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 20 | 0.66 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 20 | 0.66 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 20 | 0.66 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD11 | 12 | 0.66 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD12 | 12 | 0.66 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD13 | 12 | 0.66 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD11 | 14 | 0.66 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD12 | 14 | 0.66 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD13 | 14 | 0.66 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG2 | 12 | 0.66 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HG3 | 12 | 0.66 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG2 | 12 | 0.66 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HG3 | 12 | 0.66 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG2 | 12 | 0.66 |
| (1,1386) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HG3 | 12 | 0.66 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB1 | 19 | 0.66 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB2 | 19 | 0.66 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB3 | 19 | 0.66 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB1 | 19 | 0.66 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB2 | 19 | 0.66 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB3 | 19 | 0.66 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB1 | 19 | 0.66 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB2 | 19 | 0.66 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB3 | 19 | 0.66 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 1 | 0.66 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 1 | 0.66 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 1 | 0.66 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 1 | 0.66 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 1 | 0.66 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 1 | 0.66 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 7 | 0.65 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 7 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 7 | 0.65 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 17 | 0.65 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 17 | 0.65 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 17 | 0.65 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 9 | 0.65 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 9 | 0.65 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 9 | 0.65 |
| (1,43) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:184:ALA:H | 12 | 0.65 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 1 | 0.65 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 1 | 0.65 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 1 | 0.65 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 1 | 0.65 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 1 | 0.65 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 1 | 0.65 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 12 | 0.65 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 12 | 0.65 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 12 | 0.65 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 12 | 0.65 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 12 | 0.65 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 12 | 0.65 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 18 | 0.65 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 18 | 0.65 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 18 | 0.65 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 18 | 0.65 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 18 | 0.65 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 18 | 0.65 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HE1 | 19 | 0.65 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HE2 | 19 | 0.65 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HE1 | 19 | 0.65 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HE2 | 19 | 0.65 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HE1 | 19 | 0.65 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HE2 | 19 | 0.65 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 9 | 0.65 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 9 | 0.65 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 6 | 0.65 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 6 | 0.65 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 1 | 0.65 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 1 | 0.65 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 1 | 0.65 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 1 | 0.65 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 1 | 0.65 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 1 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 8 | 0.65 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 8 | 0.65 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 8 | 0.65 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 8 | 0.65 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 8 | 0.65 |
| (1,3810) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 8 | 0.65 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 20 | 0.65 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 6 | 0.65 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 6 | 0.65 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 6 | 0.65 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 11 | 0.65 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 11 | 0.65 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 11 | 0.65 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 20 | 0.65 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 20 | 0.65 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 20 | 0.65 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 15 | 0.65 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 15 | 0.65 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 15 | 0.65 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 15 | 0.65 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 15 | 0.65 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 15 | 0.65 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 0.65 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 0.65 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 0.65 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 0.65 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 0.65 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 0.65 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 0.65 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 0.65 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 0.65 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 9 | 0.65 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 19 | 0.65 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 19 | 0.65 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 19 | 0.65 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 13 | 0.65 |
| (1,2576) | 1:A:59:ASN:HA | 1:A:129:ASN:HD21 | 4 | 0.65 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG21 | 8 | 0.65 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG22 | 8 | 0.65 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG23 | 8 | 0.65 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 5 | 0.65 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 1 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 1 | 0.65 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 1 | 0.65 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 5 | 0.65 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 5 | 0.65 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 5 | 0.65 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 9 | 0.65 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 9 | 0.65 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 9 | 0.65 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 0.65 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 0.65 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 0.65 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 1 | 0.65 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 1 | 0.65 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 1 | 0.65 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG11 | 11 | 0.65 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG12 | 11 | 0.65 |
| (1,2055) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:52:VAL:HG13 | 11 | 0.65 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE21 | 17 | 0.65 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE21 | 17 | 0.65 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE21 | 17 | 0.65 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE22 | 17 | 0.65 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE22 | 17 | 0.65 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE22 | 17 | 0.65 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 13 | 0.65 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 13 | 0.65 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 13 | 0.65 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 17 | 0.65 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 17 | 0.65 |
| (1,1856) | 1:A:64:ASN:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 17 | 0.65 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 15 | 0.65 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 15 | 0.65 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 15 | 0.65 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 17 | 0.65 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 17 | 0.65 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 17 | 0.65 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 17 | 0.65 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 17 | 0.65 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 17 | 0.65 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG21 | 10 | 0.65 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG22 | 10 | 0.65 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG23 | 10 | 0.65 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:72:ALA:H | 17 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:72:ALA:H | 17 | 0.65 |
| (1,1695) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:72:ALA:H | 17 | 0.65 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 4 | 0.65 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 4 | 0.65 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 4 | 0.65 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 6 | 0.65 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 6 | 0.65 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 6 | 0.65 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 14 | 0.65 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 14 | 0.65 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 14 | 0.65 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:HA | 3 | 0.65 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:HA | 3 | 0.65 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:HA | 3 | 0.65 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:HA | 16 | 0.65 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:HA | 16 | 0.65 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:HA | 16 | 0.65 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 20 | 0.65 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 20 | 0.65 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 20 | 0.65 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 20 | 0.65 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 20 | 0.65 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 20 | 0.65 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 20 | 0.65 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 20 | 0.65 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 20 | 0.65 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HA | 10 | 0.65 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HA | 10 | 0.65 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HA | 10 | 0.65 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 0.65 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 0.65 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 0.65 |
| (1,857) | 1:A:49:SER:H | 1:A:136:ARG:HD3 | 14 | 0.64 |
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 6 | 0.64 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 0.64 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 0.64 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 0.64 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 0.64 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 0.64 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 0.64 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 0.64 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 0.64 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:54:PHE:H | 5 | 0.64 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:54:PHE:H | 5 | 0.64 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:54:PHE:H | 5 | 0.64 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 2 | 0.64 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 2 | 0.64 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 2 | 0.64 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 15 | 0.64 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 15 | 0.64 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 15 | 0.64 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 15 | 0.64 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 15 | 0.64 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 15 | 0.64 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 3 | 0.64 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 3 | 0.64 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 3 | 0.64 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 3 | 0.64 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 3 | 0.64 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 3 | 0.64 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 5 | 0.64 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 5 | 0.64 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 5 | 0.64 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 5 | 0.64 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 5 | 0.64 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 5 | 0.64 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 14 | 0.64 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 14 | 0.64 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 13 | 0.64 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 13 | 0.64 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 13 | 0.64 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 15 | 0.64 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 15 | 0.64 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 15 | 0.64 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 12 | 0.64 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 12 | 0.64 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 12 | 0.64 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 0.64 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 0.64 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 0.64 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 0.64 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 0.64 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 0.64 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 0.64 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 0.64 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 0.64 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 0.64 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 0.64 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 0.64 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 0.64 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 0.64 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 0.64 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 0.64 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 0.64 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 3 | 0.64 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 3 | 0.64 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 3 | 0.64 |
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 15 | 0.64 |
| (1,3242) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HB | 20 | 0.64 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 15 | 0.64 |
| (1,3072) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:130:THR:HB | 9 | 0.64 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 12 | 0.64 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 10 | 0.64 |
| (1,2941) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:13:LYS:HA | 16 | 0.64 |
| (1,293) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:65:VAL:HG11 | 8 | 0.64 |
| (1,293) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:65:VAL:HG12 | 8 | 0.64 |
| (1,293) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:65:VAL:HG13 | 8 | 0.64 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE2 | 6 | 0.64 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE2 | 6 | 0.64 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE2 | 6 | 0.64 |
| (1,2846) | 1:A:54:PHE:HA | 1:A:55:ASN:HB3 | 13 | 0.64 |
| (1,2677) | 1:A:28:VAL:HB | 1:A:173:GLY:HA2 | 2 | 0.64 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG21 | 4 | 0.64 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG22 | 4 | 0.64 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG23 | 4 | 0.64 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG21 | 15 | 0.64 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG22 | 15 | 0.64 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG23 | 15 | 0.64 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG11 | 8 | 0.64 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG12 | 8 | 0.64 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG13 | 8 | 0.64 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 6 | 0.64 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 6 | 0.64 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 6 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:134:GLN:HE22 | 9 | 0.64 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:134:GLN:HE22 | 9 | 0.64 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:134:GLN:HE22 | 9 | 0.64 |
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 3 | 0.64 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 1 | 0.64 |
| (1,1938) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HD22 | 9 | 0.64 |
| (1,1938) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HD22 | 9 | 0.64 |
| (1,1938) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HD22 | 9 | 0.64 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 8 | 0.64 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 8 | 0.64 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 8 | 0.64 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:59:ASN:H | 10 | 0.64 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:59:ASN:H | 10 | 0.64 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:59:ASN:H | 10 | 0.64 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 1 | 0.64 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 1 | 0.64 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 1 | 0.64 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 9 | 0.64 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 9 | 0.64 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 9 | 0.64 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 16 | 0.64 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 16 | 0.64 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 16 | 0.64 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD11 | 19 | 0.64 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD12 | 19 | 0.64 |
| (1,1562) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:104:LEU:HD13 | 19 | 0.64 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 9 | 0.64 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 9 | 0.64 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 9 | 0.64 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:H | 14 | 0.64 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:H | 14 | 0.64 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:H | 14 | 0.64 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 10 | 0.64 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 10 | 0.64 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 10 | 0.64 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 6 | 0.64 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 6 | 0.64 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 6 | 0.64 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 6 | 0.64 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 6 | 0.64 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 6 | 0.64 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE21 | 10 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE21 | 10 | 0.64 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE21 | 10 | 0.64 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG11 | 19 | 0.63 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG12 | 19 | 0.63 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG13 | 19 | 0.63 |
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 17 | 0.63 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 0.63 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 0.63 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 0.63 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 15 | 0.63 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 15 | 0.63 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 15 | 0.63 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 18 | 0.63 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 18 | 0.63 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 18 | 0.63 |
| (1,3934) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:138:PHE:HZ | 18 | 0.63 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 19 | 0.63 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 19 | 0.63 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 19 | 0.63 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 19 | 0.63 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 19 | 0.63 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 19 | 0.63 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 6 | 0.63 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 6 | 0.63 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 6 | 0.63 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 6 | 0.63 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 0.63 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 0.63 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 0.63 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 0.63 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 0.63 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 0.63 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 0.63 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 0.63 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 0.63 |
| (1,3322) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:159:GLN:HB3 | 2 | 0.63 |
| (1,3322) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:159:GLN:HB3 | 6 | 0.63 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 15 | 0.63 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 15 | 0.63 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 15 | 0.63 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 7 | 0.63 |
| (1,3242) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HB | 2 | 0.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 10 | 0.63 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 10 | 0.63 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 10 | 0.63 |
| (1,2846) | 1:A:54:PHE:HA | 1:A:55:ASN:HB3 | 1 | 0.63 |
| (1,2813) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:124:LEU:HD21 | 18 | 0.63 |
| (1,2813) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:124:LEU:HD22 | 18 | 0.63 |
| (1,2813) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:124:LEU:HD23 | 18 | 0.63 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 9 | 0.63 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG21 | 17 | 0.63 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG22 | 17 | 0.63 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG23 | 17 | 0.63 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 4 | 0.63 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 4 | 0.63 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 4 | 0.63 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 7 | 0.63 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 7 | 0.63 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 7 | 0.63 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 19 | 0.63 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 19 | 0.63 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 19 | 0.63 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:H | 4 | 0.63 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:H | 4 | 0.63 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:H | 4 | 0.63 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 18 | 0.63 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG21 | 5 | 0.63 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG22 | 5 | 0.63 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG23 | 5 | 0.63 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG21 | 5 | 0.63 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG22 | 5 | 0.63 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG23 | 5 | 0.63 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG21 | 5 | 0.63 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG22 | 5 | 0.63 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG23 | 5 | 0.63 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE21 | 3 | 0.63 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE21 | 3 | 0.63 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE21 | 3 | 0.63 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE22 | 3 | 0.63 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE22 | 3 | 0.63 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE22 | 3 | 0.63 |
| (1,1938) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HD22 | 13 | 0.63 |
| (1,1938) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HD22 | 13 | 0.63 |
| (1,1938) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HD22 | 13 | 0.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 4 | 0.63 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 4 | 0.63 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 4 | 0.63 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:149:ASN:HA | 10 | 0.63 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:149:ASN:HA | 10 | 0.63 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:149:ASN:HA | 10 | 0.63 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:150:ALA:H | 6 | 0.63 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:150:ALA:H | 6 | 0.63 |
| (1,1643) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:150:ALA:H | 6 | 0.63 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG21 | 7 | 0.63 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG22 | 7 | 0.63 |
| (1,1607) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:65:VAL:HG23 | 7 | 0.63 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 4 | 0.63 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 4 | 0.63 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 4 | 0.63 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 15 | 0.63 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 15 | 0.63 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 15 | 0.63 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 10 | 0.63 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 10 | 0.63 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 10 | 0.63 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 10 | 0.63 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 10 | 0.63 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 10 | 0.63 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 10 | 0.63 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 10 | 0.63 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 10 | 0.63 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB1 | 18 | 0.63 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB2 | 18 | 0.63 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:135:ALA:HB3 | 18 | 0.63 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB1 | 18 | 0.63 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB2 | 18 | 0.63 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:135:ALA:HB3 | 18 | 0.63 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB1 | 18 | 0.63 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB2 | 18 | 0.63 |
| (1,1346) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:135:ALA:HB3 | 18 | 0.63 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 6 | 0.63 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 6 | 0.63 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 6 | 0.63 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 6 | 0.63 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 6 | 0.63 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 6 | 0.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 6 | 0.63 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 6 | 0.63 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 6 | 0.63 |
| (1,841) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:84:ASN:HD22 | 20 | 0.62 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 2 | 0.62 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 2 | 0.62 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 2 | 0.62 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG21 | 19 | 0.62 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG22 | 19 | 0.62 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG23 | 19 | 0.62 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 8 | 0.62 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 8 | 0.62 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 8 | 0.62 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 8 | 0.62 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 8 | 0.62 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 8 | 0.62 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 5 | 0.62 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 5 | 0.62 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 5 | 0.62 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 5 | 0.62 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 5 | 0.62 |
| (1,3891) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 5 | 0.62 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD1 | 13 | 0.62 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD2 | 13 | 0.62 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD1 | 13 | 0.62 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD2 | 13 | 0.62 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD1 | 13 | 0.62 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD2 | 13 | 0.62 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 7 | 0.62 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 7 | 0.62 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 7 | 0.62 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 7 | 0.62 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 7 | 0.62 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 7 | 0.62 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 16 | 0.62 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 16 | 0.62 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 16 | 0.62 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 16 | 0.62 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 16 | 0.62 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 16 | 0.62 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 18 | 0.62 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 18 | 0.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 18 | 0.62 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 10 | 0.62 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 13 | 0.62 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 13 | 0.62 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 13 | 0.62 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 18 | 0.62 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 18 | 0.62 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 18 | 0.62 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 13 | 0.62 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 17 | 0.62 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 1 | 0.62 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 10 | 0.62 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 13 | 0.62 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 17 | 0.62 |
| (1,2677) | 1:A:28:VAL:HB | 1:A:173:GLY:HA2 | 14 | 0.62 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG21 | 9 | 0.62 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG22 | 9 | 0.62 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG23 | 9 | 0.62 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 12 | 0.62 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB1 | 3 | 0.62 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB2 | 3 | 0.62 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB3 | 3 | 0.62 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB1 | 3 | 0.62 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB2 | 3 | 0.62 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB3 | 3 | 0.62 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB1 | 3 | 0.62 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB2 | 3 | 0.62 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB3 | 3 | 0.62 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 2 | 0.62 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 2 | 0.62 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 2 | 0.62 |
| (1,2168) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:19:ALA:HB1 | 6 | 0.62 |
| (1,2168) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:19:ALA:HB2 | 6 | 0.62 |
| (1,2168) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:19:ALA:HB3 | 6 | 0.62 |
| (1,2150) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HA | 14 | 0.62 |
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 20 | 0.62 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 13 | 0.62 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 13 | 0.62 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 13 | 0.62 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 9 | 0.62 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 9 | 0.62 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 9 | 0.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 16 | 0.62 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 16 | 0.62 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 16 | 0.62 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG21 | 5 | 0.62 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG22 | 5 | 0.62 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:168:THR:HG23 | 5 | 0.62 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG21 | 5 | 0.62 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG22 | 5 | 0.62 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:168:THR:HG23 | 5 | 0.62 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG21 | 5 | 0.62 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG22 | 5 | 0.62 |
| (1,1931) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:168:THR:HG23 | 5 | 0.62 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 5 | 0.62 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 5 | 0.62 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 5 | 0.62 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 5 | 0.62 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 5 | 0.62 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 5 | 0.62 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB3 | 11 | 0.62 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB3 | 11 | 0.62 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB3 | 11 | 0.62 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:H | 14 | 0.62 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:H | 14 | 0.62 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:H | 14 | 0.62 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 10 | 0.62 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 10 | 0.62 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 10 | 0.62 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 18 | 0.62 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 18 | 0.62 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 18 | 0.62 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 1 | 0.62 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 1 | 0.62 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 1 | 0.62 |
| (1,1601) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HA | 9 | 0.62 |
| (1,1601) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HA | 9 | 0.62 |
| (1,1601) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HA | 9 | 0.62 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 8 | 0.62 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 8 | 0.62 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 8 | 0.62 |
| (1,1525) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:156:VAL:HG21 | 8 | 0.62 |
| (1,1525) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:156:VAL:HG22 | 8 | 0.62 |
| (1,1525) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:156:VAL:HG23 | 8 | 0.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1525) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:156:VAL:HG21 | 8 | 0.62 |
| (1,1525) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:156:VAL:HG22 | 8 | 0.62 |
| (1,1525) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:156:VAL:HG23 | 8 | 0.62 |
| (1,1525) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:156:VAL:HG21 | 8 | 0.62 |
| (1,1525) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:156:VAL:HG22 | 8 | 0.62 |
| (1,1525) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:156:VAL:HG23 | 8 | 0.62 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:34:LEU:HD11 | 20 | 0.62 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:34:LEU:HD12 | 20 | 0.62 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:34:LEU:HD13 | 20 | 0.62 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:34:LEU:HD11 | 20 | 0.62 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:34:LEU:HD12 | 20 | 0.62 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:34:LEU:HD13 | 20 | 0.62 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:34:LEU:HD11 | 20 | 0.62 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:34:LEU:HD12 | 20 | 0.62 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:34:LEU:HD13 | 20 | 0.62 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 20 | 0.62 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 20 | 0.62 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 20 | 0.62 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 20 | 0.62 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 20 | 0.62 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 20 | 0.62 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 20 | 0.62 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 20 | 0.62 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 20 | 0.62 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HA | 19 | 0.62 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HA | 19 | 0.62 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HA | 19 | 0.62 |
| (1,1228) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:173:GLY:H | 6 | 0.62 |
| (1,1228) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:173:GLY:H | 6 | 0.62 |
| (1,1228) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:173:GLY:H | 6 | 0.62 |
| (1,841) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:84:ASN:HD22 | 2 | 0.61 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 0.61 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 0.61 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 0.61 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 7 | 0.61 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 7 | 0.61 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 7 | 0.61 |
| (1,495) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:15:GLU:H | 11 | 0.61 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 17 | 0.61 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 17 | 0.61 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 17 | 0.61 |
| (1,3969) | 1:A:11:HIS:HB2 | 1:A:11:HIS:HD2 | 19 | 0.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3962) | 1:A:176:HIS:HB3 | 1:A:176:HIS:HD2 | 11 | 0.61 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 16 | 0.61 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 16 | 0.61 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 15 | 0.61 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 19 | 0.61 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 2 | 0.61 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 2 | 0.61 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 2 | 0.61 |
| (1,3518) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:133:PHE:HE1 | 10 | 0.61 |
| (1,3518) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:133:PHE:HE2 | 10 | 0.61 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD2 | 10 | 0.61 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD3 | 10 | 0.61 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 9 | 0.61 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 9 | 0.61 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 9 | 0.61 |
| (1,331) | 1:A:150:ALA:H | 1:A:178:LYS:HE3 | 15 | 0.61 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 18 | 0.61 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 18 | 0.61 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 18 | 0.61 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 8 | 0.61 |
| (1,3242) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HB | 18 | 0.61 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 15 | 0.61 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 15 | 0.61 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 15 | 0.61 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD11 | 8 | 0.61 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD12 | 8 | 0.61 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD13 | 8 | 0.61 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 9 | 0.61 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 19 | 0.61 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:183:ASN:HB3 | 12 | 0.61 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:183:ASN:HB3 | 12 | 0.61 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:183:ASN:HB3 | 12 | 0.61 |
| (1,2780) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA2 | 15 | 0.61 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 13 | 0.61 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 15 | 0.61 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 8 | 0.61 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 8 | 0.61 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 8 | 0.61 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 12 | 0.61 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 12 | 0.61 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 12 | 0.61 |
| (1,2168) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:19:ALA:HB1 | 16 | 0.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2168) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:19:ALA:HB2 | 16 | 0.61 |
| (1,2168) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:19:ALA:HB3 | 16 | 0.61 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 16 | 0.61 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG21 | 7 | 0.61 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG22 | 7 | 0.61 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG23 | 7 | 0.61 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG21 | 7 | 0.61 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG22 | 7 | 0.61 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG23 | 7 | 0.61 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG21 | 7 | 0.61 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG22 | 7 | 0.61 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG23 | 7 | 0.61 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 10 | 0.61 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 10 | 0.61 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 10 | 0.61 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG21 | 3 | 0.61 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG22 | 3 | 0.61 |
| (1,1712) | 1:A:78:ILE:HB | 1:A:85:VAL:HG23 | 3 | 0.61 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 18 | 0.61 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 18 | 0.61 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 18 | 0.61 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 18 | 0.61 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 18 | 0.61 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 18 | 0.61 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 18 | 0.61 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 18 | 0.61 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 18 | 0.61 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 8 | 0.61 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 8 | 0.61 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 8 | 0.61 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB1 | 18 | 0.61 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB2 | 18 | 0.61 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB3 | 18 | 0.61 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB1 | 18 | 0.61 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB2 | 18 | 0.61 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB3 | 18 | 0.61 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB1 | 18 | 0.61 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB2 | 18 | 0.61 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB3 | 18 | 0.61 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:HA | 1 | 0.61 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:HA | 1 | 0.61 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:HA | 1 | 0.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:HA | 15 | 0.61 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:HA | 15 | 0.61 |
| (1,1564) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:HA | 15 | 0.61 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 2 | 0.61 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 2 | 0.61 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 2 | 0.61 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 16 | 0.61 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 16 | 0.61 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 16 | 0.61 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 17 | 0.61 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 17 | 0.61 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 17 | 0.61 |
| (1,149) | 1:A:123:THR:H | 1:A:124:LEU:HD21 | 15 | 0.61 |
| (1,149) | 1:A:123:THR:H | 1:A:124:LEU:HD22 | 15 | 0.61 |
| (1,149) | 1:A:123:THR:H | 1:A:124:LEU:HD23 | 15 | 0.61 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HA | 17 | 0.61 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HA | 17 | 0.61 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HA | 17 | 0.61 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 16 | 0.61 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 16 | 0.61 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 16 | 0.61 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 16 | 0.61 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 16 | 0.61 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 16 | 0.61 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 16 | 0.61 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 16 | 0.61 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 16 | 0.61 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:124:LEU:HD11 | 15 | 0.61 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:124:LEU:HD12 | 15 | 0.61 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:124:LEU:HD13 | 15 | 0.61 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:124:LEU:HD11 | 15 | 0.61 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:124:LEU:HD12 | 15 | 0.61 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:124:LEU:HD13 | 15 | 0.61 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:124:LEU:HD11 | 15 | 0.61 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:124:LEU:HD12 | 15 | 0.61 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:124:LEU:HD13 | 15 | 0.61 |
| (1,1156) | 1:A:67:SER:H | 1:A:124:LEU:HD11 | 10 | 0.61 |
| (1,1156) | 1:A:67:SER:H | 1:A:124:LEU:HD12 | 10 | 0.61 |
| (1,1156) | 1:A:67:SER:H | 1:A:124:LEU:HD13 | 10 | 0.61 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE21 | 15 | 0.61 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE21 | 15 | 0.61 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE21 | 15 | 0.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 8 | 0.6 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 10 | 0.6 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 10 | 0.6 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 10 | 0.6 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 10 | 0.6 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 10 | 0.6 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 10 | 0.6 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 6 | 0.6 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 6 | 0.6 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:111:LEU:HD11 | 19 | 0.6 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:111:LEU:HD12 | 19 | 0.6 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:111:LEU:HD13 | 19 | 0.6 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:111:LEU:HD11 | 19 | 0.6 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:111:LEU:HD12 | 19 | 0.6 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:111:LEU:HD13 | 19 | 0.6 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:111:LEU:HD11 | 19 | 0.6 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:111:LEU:HD12 | 19 | 0.6 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:111:LEU:HD13 | 19 | 0.6 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG11 | 6 | 0.6 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG12 | 6 | 0.6 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG13 | 6 | 0.6 |
| (1,3527) | 1:A:176:HIS:HB2 | 1:A:178:LYS:HE2 | 13 | 0.6 |
| (1,3469) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:112:THR:HA | 5 | 0.6 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 8 | 0.6 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 8 | 0.6 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 8 | 0.6 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 3 | 0.6 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 3 | 0.6 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 3 | 0.6 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 3 | 0.6 |
| (1,2804) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HB3 | 2 | 0.6 |
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 20 | 0.6 |
| (1,2687) | 1:A:27:SER:HB2 | 1:A:56:ILE:HD11 | 19 | 0.6 |
| (1,2687) | 1:A:27:SER:HB2 | 1:A:56:ILE:HD12 | 19 | 0.6 |
| (1,2687) | 1:A:27:SER:HB2 | 1:A:56:ILE:HD13 | 19 | 0.6 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 4 | 0.6 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 20 | 0.6 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 7 | 0.6 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 7 | 0.6 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 7 | 0.6 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 6 | 0.6 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 6 | 0.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 6 | 0.6 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 13 | 0.6 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 13 | 0.6 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 13 | 0.6 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 15 | 0.6 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 15 | 0.6 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 15 | 0.6 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 19 | 0.6 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 19 | 0.6 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 19 | 0.6 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 19 | 0.6 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 19 | 0.6 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 19 | 0.6 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 19 | 0.6 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 19 | 0.6 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 19 | 0.6 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 0.6 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 0.6 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 0.6 |
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 6 | 0.6 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HA | 3 | 0.6 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HA | 3 | 0.6 |
| (1,2114) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HA | 3 | 0.6 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 17 | 0.6 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 17 | 0.6 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 17 | 0.6 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG11 | 18 | 0.6 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG12 | 18 | 0.6 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG13 | 18 | 0.6 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG21 | 16 | 0.6 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG22 | 16 | 0.6 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG23 | 16 | 0.6 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG21 | 16 | 0.6 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG22 | 16 | 0.6 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG23 | 16 | 0.6 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG21 | 16 | 0.6 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG22 | 16 | 0.6 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG23 | 16 | 0.6 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 12 | 0.6 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 12 | 0.6 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 12 | 0.6 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 5 | 0.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 5 | 0.6 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 5 | 0.6 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 20 | 0.6 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 20 | 0.6 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 20 | 0.6 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HB2 | 9 | 0.6 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HB2 | 9 | 0.6 |
| (1,1987) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HB2 | 9 | 0.6 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 9 | 0.6 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 9 | 0.6 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 9 | 0.6 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 9 | 0.6 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 9 | 0.6 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 9 | 0.6 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG21 | 5 | 0.6 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG22 | 5 | 0.6 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG23 | 5 | 0.6 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG21 | 15 | 0.6 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG22 | 15 | 0.6 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG23 | 15 | 0.6 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG21 | 19 | 0.6 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG22 | 19 | 0.6 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG23 | 19 | 0.6 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 14 | 0.6 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 14 | 0.6 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 14 | 0.6 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:H | 19 | 0.6 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:H | 19 | 0.6 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:H | 19 | 0.6 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 7 | 0.6 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 7 | 0.6 |
| (1,1572) | 1:A:102:GLN:HG3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 7 | 0.6 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 1 | 0.6 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 1 | 0.6 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 1 | 0.6 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:ASN:H | 19 | 0.6 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:ASN:H | 19 | 0.6 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:ASN:H | 19 | 0.6 |
| (1,1312) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:124:LEU:HD11 | 18 | 0.6 |
| (1,1312) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:124:LEU:HD12 | 18 | 0.6 |
| (1,1312) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:124:LEU:HD13 | 18 | 0.6 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 12 | 0.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 12 | 0.6 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 12 | 0.6 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 12 | 0.6 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 12 | 0.6 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 12 | 0.6 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 0.6 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 0.6 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 0.6 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 12 | 0.59 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 0.59 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 0.59 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 0.59 |
| (1,498) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:170:VAL:H | 4 | 0.59 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:57:GLN:H | 6 | 0.59 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:57:GLN:H | 6 | 0.59 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:57:GLN:H | 6 | 0.59 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 16 | 0.59 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 16 | 0.59 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 16 | 0.59 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 16 | 0.59 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 16 | 0.59 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 16 | 0.59 |
| (1,3969) | 1:A:11:HIS:HB2 | 1:A:11:HIS:HD2 | 12 | 0.59 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 9 | 0.59 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 9 | 0.59 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 9 | 0.59 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 9 | 0.59 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 9 | 0.59 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 9 | 0.59 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 17 | 0.59 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 17 | 0.59 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 17 | 0.59 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 17 | 0.59 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 17 | 0.59 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 17 | 0.59 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 4 | 0.59 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 4 | 0.59 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 4 | 0.59 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 4 | 0.59 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 4 | 0.59 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 4 | 0.59 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 13 | 0.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 13 | 0.59 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 18 | 0.59 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 18 | 0.59 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 5 | 0.59 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 5 | 0.59 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 5 | 0.59 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 5 | 0.59 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 5 | 0.59 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 5 | 0.59 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:111:LEU:HD11 | 16 | 0.59 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:111:LEU:HD12 | 16 | 0.59 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:111:LEU:HD13 | 16 | 0.59 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:111:LEU:HD11 | 16 | 0.59 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:111:LEU:HD12 | 16 | 0.59 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:111:LEU:HD13 | 16 | 0.59 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:111:LEU:HD11 | 16 | 0.59 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:111:LEU:HD12 | 16 | 0.59 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:111:LEU:HD13 | 16 | 0.59 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 1 | 0.59 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 1 | 0.59 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 1 | 0.59 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 4 | 0.59 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 4 | 0.59 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 4 | 0.59 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 10 | 0.59 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 10 | 0.59 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 10 | 0.59 |
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 5 | 0.59 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 1 | 0.59 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 6 | 0.59 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 11 | 0.59 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 14 | 0.59 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 15 | 0.59 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 1 | 0.59 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 1 | 0.59 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 1 | 0.59 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 5 | 0.59 |
| (1,3133) | 1:A:98:ASN:HB2 | 1:A:141:GLY:HA2 | 18 | 0.59 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD11 | 18 | 0.59 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD12 | 18 | 0.59 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD13 | 18 | 0.59 |
| (1,3042) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:172:GLY:H | 1 | 0.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2846) | 1:A:54:PHE:HA | 1:A:55:ASN:HB3 | 9 | 0.59 |
| (1,2745) | 1:A:104:LEU:HB2 | 1:A:108:GLY:HA3 | 4 | 0.59 |
| (1,2729) | 1:A:14:GLY:HA2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 2 | 0.59 |
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 3 | 0.59 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 5 | 0.59 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 5 | 0.59 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 5 | 0.59 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:102:GLN:H | 15 | 0.59 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:102:GLN:H | 15 | 0.59 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:102:GLN:H | 15 | 0.59 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:134:GLN:HE22 | 11 | 0.59 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:134:GLN:HE22 | 11 | 0.59 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:134:GLN:HE22 | 11 | 0.59 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 14 | 0.59 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 14 | 0.59 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 14 | 0.59 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 14 | 0.59 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 14 | 0.59 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 14 | 0.59 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 14 | 0.59 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 14 | 0.59 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 14 | 0.59 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG21 | 9 | 0.59 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG22 | 9 | 0.59 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG23 | 9 | 0.59 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG21 | 9 | 0.59 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG22 | 9 | 0.59 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG23 | 9 | 0.59 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG21 | 9 | 0.59 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG22 | 9 | 0.59 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG23 | 9 | 0.59 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 4 | 0.59 |
| (1,1820) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:11:HIS:HA | 15 | 0.59 |
| (1,1820) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:11:HIS:HA | 15 | 0.59 |
| (1,1820) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:11:HIS:HA | 15 | 0.59 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 16 | 0.59 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 16 | 0.59 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 16 | 0.59 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 16 | 0.59 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 16 | 0.59 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 16 | 0.59 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG21 | 2 | 0.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG22 | 2 | 0.59 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG23 | 2 | 0.59 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG21 | 8 | 0.59 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG22 | 8 | 0.59 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG23 | 8 | 0.59 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG21 | 12 | 0.59 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG22 | 12 | 0.59 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG23 | 12 | 0.59 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 11 | 0.59 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 11 | 0.59 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 11 | 0.59 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 2 | 0.59 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 2 | 0.59 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 2 | 0.59 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 16 | 0.59 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 16 | 0.59 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 16 | 0.59 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB1 | 11 | 0.59 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB2 | 11 | 0.59 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB3 | 11 | 0.59 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB1 | 11 | 0.59 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB2 | 11 | 0.59 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB3 | 11 | 0.59 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB1 | 11 | 0.59 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB2 | 11 | 0.59 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB3 | 11 | 0.59 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 20 | 0.59 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 20 | 0.59 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 20 | 0.59 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HA | 13 | 0.59 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HA | 13 | 0.59 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HA | 13 | 0.59 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HA | 19 | 0.59 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HA | 19 | 0.59 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HA | 19 | 0.59 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:131:ILE:HG13 | 12 | 0.59 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:131:ILE:HG13 | 12 | 0.59 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:131:ILE:HG13 | 12 | 0.59 |
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 11 | 0.58 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 13 | 0.58 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 13 | 0.58 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 13 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 14 | 0.58 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 7 | 0.58 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 7 | 0.58 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 7 | 0.58 |
| (1,3969) | 1:A:11:HIS:HB2 | 1:A:11:HIS:HD2 | 6 | 0.58 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 7 | 0.58 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 7 | 0.58 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 1 | 0.58 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 1 | 0.58 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 2 | 0.58 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 2 | 0.58 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 6 | 0.58 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 6 | 0.58 |
| (1,386) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 6 | 0.58 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 10 | 0.58 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 10 | 0.58 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 3 | 0.58 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 17 | 0.58 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 0.58 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 0.58 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 0.58 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 0.58 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 0.58 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 0.58 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 0.58 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 0.58 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 0.58 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 0.58 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 0.58 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 0.58 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 0.58 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 0.58 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 0.58 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 0.58 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 0.58 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 0.58 |
| (1,3377) | 1:A:95:SER:H | 1:A:95:SER:HB2 | 7 | 0.58 |
| (1,3273) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:159:GLN:HG2 | 3 | 0.58 |
| (1,3273) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:159:GLN:HG2 | 7 | 0.58 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD11 | 4 | 0.58 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD12 | 4 | 0.58 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD13 | 4 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 7 | 0.58 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 7 | 0.58 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 7 | 0.58 |
| (1,2745) | 1:A:104:LEU:HB2 | 1:A:108:GLY:HA3 | 9 | 0.58 |
| (1,2729) | 1:A:14:GLY:HA2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 17 | 0.58 |
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 6 | 0.58 |
| (1,2677) | 1:A:28:VAL:HB | 1:A:173:GLY:HA2 | 4 | 0.58 |
| (1,2572) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:129:ASN:HD22 | 8 | 0.58 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 6 | 0.58 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 9 | 0.58 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 18 | 0.58 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 19 | 0.58 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 13 | 0.58 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 13 | 0.58 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 13 | 0.58 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 18 | 0.58 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 18 | 0.58 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 18 | 0.58 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:102:GLN:H | 4 | 0.58 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:102:GLN:H | 4 | 0.58 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:102:GLN:H | 4 | 0.58 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:102:GLN:H | 7 | 0.58 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:102:GLN:H | 7 | 0.58 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:102:GLN:H | 7 | 0.58 |
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 9 | 0.58 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 12 | 0.58 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 12 | 0.58 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 12 | 0.58 |
| (1,2101) | 1:A:114:ASP:HB3 | 1:A:116:ALA:HB1 | 18 | 0.58 |
| (1,2101) | 1:A:114:ASP:HB3 | 1:A:116:ALA:HB2 | 18 | 0.58 |
| (1,2101) | 1:A:114:ASP:HB3 | 1:A:116:ALA:HB3 | 18 | 0.58 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG11 | 10 | 0.58 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG12 | 10 | 0.58 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG13 | 10 | 0.58 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG21 | 9 | 0.58 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG22 | 9 | 0.58 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG23 | 9 | 0.58 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 4 | 0.58 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 4 | 0.58 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 4 | 0.58 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 11 | 0.58 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 11 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 11 | 0.58 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:H | 16 | 0.58 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:H | 16 | 0.58 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:H | 16 | 0.58 |
| (1,1588) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:119:SER:HA | 18 | 0.58 |
| (1,1588) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:119:SER:HA | 18 | 0.58 |
| (1,1588) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:119:SER:HA | 18 | 0.58 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 3 | 0.58 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 3 | 0.58 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 3 | 0.58 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 4 | 0.58 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 4 | 0.58 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 4 | 0.58 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 8 | 0.58 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 8 | 0.58 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 8 | 0.58 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 14 | 0.58 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 14 | 0.58 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 14 | 0.58 |
| (1,1393) | 1:A:48:THR:HA | 1:A:138:PHE:HB3 | 3 | 0.58 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 14 | 0.58 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 14 | 0.58 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 14 | 0.58 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 14 | 0.58 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 14 | 0.58 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 14 | 0.58 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 13 | 0.58 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 1 | 0.57 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 1 | 0.57 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 1 | 0.57 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 9 | 0.57 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 9 | 0.57 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 9 | 0.57 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 4 | 0.57 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 4 | 0.57 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 4 | 0.57 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 4 | 0.57 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 4 | 0.57 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 4 | 0.57 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE1 | 20 | 0.57 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HE2 | 20 | 0.57 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE1 | 20 | 0.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HE2 | 20 | 0.57 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE1 | 20 | 0.57 |
| (1,3926) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HE2 | 20 | 0.57 |
| (1,3778) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HB | 19 | 0.57 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 1 | 0.57 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 13 | 0.57 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 18 | 0.57 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 3 | 0.57 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 0.57 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 0.57 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 0.57 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 0.57 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 0.57 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 0.57 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 0.57 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 0.57 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 0.57 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 3 | 0.57 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 3 | 0.57 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 3 | 0.57 |
| (1,3497) | 1:A:106:ARG:HB2 | 1:A:132:PRO:HD2 | 7 | 0.57 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 11 | 0.57 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 11 | 0.57 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 11 | 0.57 |
| (1,3322) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:159:GLN:HB3 | 16 | 0.57 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 8 | 0.57 |
| (1,2881) | 1:A:155:LYS:HE3 | 1:A:171:ASN:HD22 | 2 | 0.57 |
| (1,2878) | 1:A:115:GLY:HA2 | 1:A:155:LYS:HE3 | 19 | 0.57 |
| (1,2846) | 1:A:54:PHE:HA | 1:A:55:ASN:HB3 | 7 | 0.57 |
| (1,2745) | 1:A:104:LEU:HB2 | 1:A:108:GLY:HA3 | 3 | 0.57 |
| (1,2745) | 1:A:104:LEU:HB2 | 1:A:108:GLY:HA3 | 13 | 0.57 |
| (1,2745) | 1:A:104:LEU:HB2 | 1:A:108:GLY:HA3 | 19 | 0.57 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB1 | 3 | 0.57 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB2 | 3 | 0.57 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB3 | 3 | 0.57 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 17 | 0.57 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 7 | 0.57 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 13 | 0.57 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 10 | 0.57 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 10 | 0.57 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 10 | 0.57 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 17 | 0.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 17 | 0.57 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 17 | 0.57 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 3 | 0.57 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 3 | 0.57 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 3 | 0.57 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:102:GLN:H | 19 | 0.57 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:102:GLN:H | 19 | 0.57 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:102:GLN:H | 19 | 0.57 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 15 | 0.57 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 15 | 0.57 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 15 | 0.57 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 16 | 0.57 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 16 | 0.57 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 16 | 0.57 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 1 | 0.57 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 1 | 0.57 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 1 | 0.57 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG21 | 4 | 0.57 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG22 | 4 | 0.57 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG23 | 4 | 0.57 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG21 | 4 | 0.57 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG22 | 4 | 0.57 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG23 | 4 | 0.57 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG21 | 4 | 0.57 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG22 | 4 | 0.57 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG23 | 4 | 0.57 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG21 | 12 | 0.57 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG22 | 12 | 0.57 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG23 | 12 | 0.57 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG21 | 12 | 0.57 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG22 | 12 | 0.57 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG23 | 12 | 0.57 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG21 | 12 | 0.57 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG22 | 12 | 0.57 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG23 | 12 | 0.57 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:H | 10 | 0.57 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:H | 10 | 0.57 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:H | 10 | 0.57 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 12 | 0.57 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 12 | 0.57 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 12 | 0.57 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG11 | 2 | 0.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG12 | 2 | 0.57 |
| (1,1746) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:23:VAL:HG13 | 2 | 0.57 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG21 | 17 | 0.57 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG22 | 17 | 0.57 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG23 | 17 | 0.57 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 11 | 0.57 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 11 | 0.57 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 11 | 0.57 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 3 | 0.57 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 3 | 0.57 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 3 | 0.57 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 10 | 0.57 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 10 | 0.57 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 10 | 0.57 |
| (1,1583) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:119:SER:H | 18 | 0.57 |
| (1,1583) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:119:SER:H | 18 | 0.57 |
| (1,1583) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:119:SER:H | 18 | 0.57 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 5 | 0.57 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 5 | 0.57 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 5 | 0.57 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 19 | 0.57 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 19 | 0.57 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 19 | 0.57 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 13 | 0.57 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 13 | 0.57 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 13 | 0.57 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 13 | 0.57 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 13 | 0.57 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 13 | 0.57 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 18 | 0.57 |
| (1,857) | 1:A:49:SER:H | 1:A:136:ARG:HD3 | 18 | 0.56 |
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 18 | 0.56 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 6 | 0.56 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 6 | 0.56 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 6 | 0.56 |
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 17 | 0.56 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 18 | 0.56 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 18 | 0.56 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 18 | 0.56 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 18 | 0.56 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 18 | 0.56 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 18 | 0.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 2 | 0.56 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 2 | 0.56 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 2 | 0.56 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 2 | 0.56 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 2 | 0.56 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 2 | 0.56 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE1 | 5 | 0.56 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE2 | 5 | 0.56 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 11 | 0.56 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 11 | 0.56 |
| (1,387) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:H | 10 | 0.56 |
| (1,387) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:H | 10 | 0.56 |
| (1,387) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:H | 10 | 0.56 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 11 | 0.56 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 11 | 0.56 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 11 | 0.56 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 1 | 0.56 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 1 | 0.56 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 1 | 0.56 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 4 | 0.56 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 4 | 0.56 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 4 | 0.56 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 14 | 0.56 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 14 | 0.56 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 14 | 0.56 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 3 | 0.56 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 3 | 0.56 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 3 | 0.56 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB3 | 20 | 0.56 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB3 | 20 | 0.56 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB3 | 20 | 0.56 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD11 | 15 | 0.56 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD12 | 15 | 0.56 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD13 | 15 | 0.56 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB2 | 10 | 0.56 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB2 | 10 | 0.56 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB2 | 10 | 0.56 |
| (1,2804) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HB3 | 20 | 0.56 |
| (1,2745) | 1:A:104:LEU:HB2 | 1:A:108:GLY:HA3 | 18 | 0.56 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 20 | 0.56 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 20 | 0.56 |
| (1,2732) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 20 | 0.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2540) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:152:ALA:HA | 8 | 0.56 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 12 | 0.56 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 12 | 0.56 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 12 | 0.56 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 5 | 0.56 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 5 | 0.56 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 5 | 0.56 |
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 8 | 0.56 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE21 | 4 | 0.56 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE21 | 4 | 0.56 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE21 | 4 | 0.56 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE22 | 4 | 0.56 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE22 | 4 | 0.56 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE22 | 4 | 0.56 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:173:GLY:HA2 | 15 | 0.56 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:173:GLY:HA2 | 15 | 0.56 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:173:GLY:HA2 | 15 | 0.56 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 14 | 0.56 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 14 | 0.56 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 14 | 0.56 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 14 | 0.56 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 14 | 0.56 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 14 | 0.56 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 20 | 0.56 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 20 | 0.56 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 20 | 0.56 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 3 | 0.56 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 3 | 0.56 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 3 | 0.56 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:ASN:H | 12 | 0.56 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:ASN:H | 12 | 0.56 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:ASN:H | 12 | 0.56 |
| (1,1467) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:LYS:HG2 | 4 | 0.56 |
| (1,1393) | 1:A:48:THR:HA | 1:A:138:PHE:HB3 | 18 | 0.56 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:HA | 16 | 0.56 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:HA | 16 | 0.56 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:HA | 16 | 0.56 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:H | 19 | 0.56 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:H | 19 | 0.56 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:H | 19 | 0.56 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 3 | 0.56 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 3 | 0.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 3 | 0.56 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 3 | 0.56 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 3 | 0.56 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 3 | 0.56 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 4 | 0.56 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 4 | 0.56 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 4 | 0.56 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 4 | 0.56 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 4 | 0.56 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 4 | 0.56 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 14 | 0.56 |
| (1,1019) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:138:PHE:HB2 | 9 | 0.56 |
| (1,857) | 1:A:49:SER:H | 1:A:136:ARG:HD3 | 13 | 0.55 |
| (1,841) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:84:ASN:HD22 | 11 | 0.55 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 0.55 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 0.55 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 0.55 |
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 12 | 0.55 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 1 | 0.55 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 1 | 0.55 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 1 | 0.55 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 2 | 0.55 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 2 | 0.55 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 2 | 0.55 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 6 | 0.55 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 6 | 0.55 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 6 | 0.55 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 6 | 0.55 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 6 | 0.55 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 6 | 0.55 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 17 | 0.55 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 17 | 0.55 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 17 | 0.55 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 17 | 0.55 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 17 | 0.55 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 17 | 0.55 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG21 | 1 | 0.55 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG22 | 1 | 0.55 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG23 | 1 | 0.55 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 8 | 0.55 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 8 | 0.55 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 2 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 4 | 0.55 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 0.55 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 0.55 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 0.55 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 0.55 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 0.55 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 0.55 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 0.55 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 0.55 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 0.55 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 14 | 0.55 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 14 | 0.55 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 14 | 0.55 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 0.55 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 0.55 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 0.55 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 0.55 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 0.55 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 0.55 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 0.55 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 0.55 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 0.55 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD2 | 11 | 0.55 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD3 | 11 | 0.55 |
| (1,3486) | 1:A:78:ILE:HG12 | 1:A:79:ASP:HB3 | 10 | 0.55 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 7 | 0.55 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 7 | 0.55 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 7 | 0.55 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 16 | 0.55 |
| (1,3219) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:180:GLU:HB2 | 4 | 0.55 |
| (1,3219) | 1:A:36:GLN:HG2 | 1:A:180:GLU:HB2 | 4 | 0.55 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD11 | 2 | 0.55 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD12 | 2 | 0.55 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD13 | 2 | 0.55 |
| (1,3020) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:HB | 4 | 0.55 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB2 | 13 | 0.55 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB2 | 13 | 0.55 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB2 | 13 | 0.55 |
| (1,2860) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:119:SER:HB3 | 17 | 0.55 |
| (1,2846) | 1:A:54:PHE:HA | 1:A:55:ASN:HB3 | 6 | 0.55 |
| (1,2729) | 1:A:14:GLY:HA2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 12 | 0.55 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 2 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 2 | 0.55 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 2 | 0.55 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 4 | 0.55 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 4 | 0.55 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 4 | 0.55 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB1 | 1:A:149:ASN:HD21 | 4 | 0.55 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB2 | 1:A:149:ASN:HD21 | 4 | 0.55 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB3 | 1:A:149:ASN:HD21 | 4 | 0.55 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG21 | 17 | 0.55 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG22 | 17 | 0.55 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG23 | 17 | 0.55 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG21 | 17 | 0.55 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG22 | 17 | 0.55 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG23 | 17 | 0.55 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG21 | 17 | 0.55 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG22 | 17 | 0.55 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG23 | 17 | 0.55 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:H | 1 | 0.55 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:H | 1 | 0.55 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:H | 1 | 0.55 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:H | 16 | 0.55 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:H | 16 | 0.55 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:H | 16 | 0.55 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG21 | 2 | 0.55 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG22 | 2 | 0.55 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG23 | 2 | 0.55 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG21 | 2 | 0.55 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG22 | 2 | 0.55 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG23 | 2 | 0.55 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG21 | 2 | 0.55 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG22 | 2 | 0.55 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG23 | 2 | 0.55 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 6 | 0.55 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 6 | 0.55 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 6 | 0.55 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 7 | 0.55 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 7 | 0.55 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 7 | 0.55 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 15 | 0.55 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 15 | 0.55 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 15 | 0.55 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 6 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 6 | 0.55 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 6 | 0.55 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 6 | 0.55 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 6 | 0.55 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 6 | 0.55 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 17 | 0.55 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 17 | 0.55 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 17 | 0.55 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG21 | 7 | 0.55 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG22 | 7 | 0.55 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG23 | 7 | 0.55 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB3 | 2 | 0.55 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB3 | 2 | 0.55 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB3 | 2 | 0.55 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 5 | 0.55 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 5 | 0.55 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 5 | 0.55 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG21 | 11 | 0.55 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG22 | 11 | 0.55 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG23 | 11 | 0.55 |
| (1,1583) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:119:SER:H | 19 | 0.55 |
| (1,1583) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:119:SER:H | 19 | 0.55 |
| (1,1583) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:119:SER:H | 19 | 0.55 |
| (1,1583) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:119:SER:H | 20 | 0.55 |
| (1,1583) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:119:SER:H | 20 | 0.55 |
| (1,1583) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:119:SER:H | 20 | 0.55 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 7 | 0.55 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 7 | 0.55 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 7 | 0.55 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 7 | 0.55 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 7 | 0.55 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 7 | 0.55 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 7 | 0.55 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 7 | 0.55 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 7 | 0.55 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.55 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.55 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.55 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.55 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.55 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.55 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.55 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.55 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:H | 20 | 0.55 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:H | 20 | 0.55 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:H | 20 | 0.55 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 2 | 0.55 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 2 | 0.55 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 2 | 0.55 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HA | 7 | 0.55 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HA | 7 | 0.55 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HA | 7 | 0.55 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HA | 8 | 0.55 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HA | 8 | 0.55 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HA | 8 | 0.55 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 0.54 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 0.54 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 0.54 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 19 | 0.54 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 19 | 0.54 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 19 | 0.54 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 12 | 0.54 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 12 | 0.54 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 12 | 0.54 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 10 | 0.54 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 10 | 0.54 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 10 | 0.54 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 10 | 0.54 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 10 | 0.54 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 10 | 0.54 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 9 | 0.54 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 9 | 0.54 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 12 | 0.54 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG11 | 10 | 0.54 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG12 | 10 | 0.54 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG13 | 10 | 0.54 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 15 | 0.54 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 10 | 0.54 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 13 | 0.54 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 13 | 0.54 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 13 | 0.54 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 0.54 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 0.54 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 0.54 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 0.54 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 0.54 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 0.54 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 0.54 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 0.54 |
| (1,3469) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:112:THR:HA | 1 | 0.54 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 14 | 0.54 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 14 | 0.54 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 14 | 0.54 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 4 | 0.54 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:183:ASN:HB3 | 8 | 0.54 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:183:ASN:HB3 | 8 | 0.54 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:183:ASN:HB3 | 8 | 0.54 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB2 | 5 | 0.54 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB2 | 5 | 0.54 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB2 | 5 | 0.54 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB2 | 14 | 0.54 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB2 | 14 | 0.54 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB2 | 14 | 0.54 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG11 | 15 | 0.54 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG12 | 15 | 0.54 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG13 | 15 | 0.54 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG11 | 15 | 0.54 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG12 | 15 | 0.54 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG13 | 15 | 0.54 |
| (1,2941) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:13:LYS:HA | 6 | 0.54 |
| (1,2899) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:121:GLU:HG2 | 9 | 0.54 |
| (1,2899) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:121:GLU:HG2 | 9 | 0.54 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE2 | 12 | 0.54 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE2 | 12 | 0.54 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE2 | 12 | 0.54 |
| (1,2780) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA2 | 11 | 0.54 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 11 | 0.54 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 11 | 0.54 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 11 | 0.54 |
| (1,2729) | 1:A:14:GLY:HA2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 9 | 0.54 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB1 | 10 | 0.54 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB2 | 10 | 0.54 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB3 | 10 | 0.54 |
| (1,2435) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:105:ASP:HB2 | 7 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 16 | 0.54 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 7 | 0.54 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 7 | 0.54 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 7 | 0.54 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 8 | 0.54 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 8 | 0.54 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 8 | 0.54 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 17 | 0.54 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 17 | 0.54 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 17 | 0.54 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:102:GLN:H | 17 | 0.54 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:102:GLN:H | 17 | 0.54 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:102:GLN:H | 17 | 0.54 |
| (1,2211) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:136:ARG:HD2 | 8 | 0.54 |
| (1,2211) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:136:ARG:HD2 | 8 | 0.54 |
| (1,2211) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:136:ARG:HD2 | 8 | 0.54 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.54 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.54 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.54 |
| (1,2105) | 1:A:9:THR:HA | 1:A:10:VAL:HG21 | 17 | 0.54 |
| (1,2105) | 1:A:9:THR:HA | 1:A:10:VAL:HG22 | 17 | 0.54 |
| (1,2105) | 1:A:9:THR:HA | 1:A:10:VAL:HG23 | 17 | 0.54 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 10 | 0.54 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 10 | 0.54 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 10 | 0.54 |
| (1,1974) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:124:LEU:HD21 | 10 | 0.54 |
| (1,1974) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:124:LEU:HD22 | 10 | 0.54 |
| (1,1974) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:124:LEU:HD23 | 10 | 0.54 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 11 | 0.54 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 11 | 0.54 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 11 | 0.54 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG11 | 20 | 0.54 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG12 | 20 | 0.54 |
| (1,1922) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:85:VAL:HG13 | 20 | 0.54 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 1 | 0.54 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 1 | 0.54 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 1 | 0.54 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 10 | 0.54 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 10 | 0.54 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 10 | 0.54 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 10 | 0.54 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 10 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 10 | 0.54 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 10 | 0.54 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 10 | 0.54 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 10 | 0.54 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG21 | 15 | 0.54 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG22 | 15 | 0.54 |
| (1,1794) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HG23 | 15 | 0.54 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 11 | 0.54 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 11 | 0.54 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 11 | 0.54 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 11 | 0.54 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 11 | 0.54 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 11 | 0.54 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 5 | 0.54 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 5 | 0.54 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 5 | 0.54 |
| (1,1589) | 1:A:111:LEU:HA | 1:A:111:LEU:HD21 | 16 | 0.54 |
| (1,1589) | 1:A:111:LEU:HA | 1:A:111:LEU:HD22 | 16 | 0.54 |
| (1,1589) | 1:A:111:LEU:HA | 1:A:111:LEU:HD23 | 16 | 0.54 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 13 | 0.54 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 13 | 0.54 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 13 | 0.54 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 8 | 0.54 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 8 | 0.54 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 8 | 0.54 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 8 | 0.54 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 8 | 0.54 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 8 | 0.54 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 8 | 0.54 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 8 | 0.54 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 8 | 0.54 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 3 | 0.54 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 3 | 0.54 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 3 | 0.54 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HA | 6 | 0.54 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HA | 6 | 0.54 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HA | 6 | 0.54 |
| (1,942) | 1:A:24:ASP:HB2 | 1:A:27:SER:H | 20 | 0.53 |
| (1,631) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:95:SER:H | 5 | 0.53 |
| (1,631) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:95:SER:H | 14 | 0.53 |
| (1,607) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:159:GLN:H | 13 | 0.53 |
| (1,607) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:159:GLN:H | 13 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,607) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:159:GLN:H | 13 | 0.53 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 19 | 0.53 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 19 | 0.53 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 19 | 0.53 |
| (1,495) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:15:GLU:H | 13 | 0.53 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG21 | 8 | 0.53 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG22 | 8 | 0.53 |
| (1,409) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:71:VAL:HG23 | 8 | 0.53 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 1 | 0.53 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 1 | 0.53 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 1 | 0.53 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 1 | 0.53 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 1 | 0.53 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 1 | 0.53 |
| (1,3934) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:138:PHE:HZ | 19 | 0.53 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD1 | 7 | 0.53 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD2 | 7 | 0.53 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD1 | 7 | 0.53 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD2 | 7 | 0.53 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD1 | 7 | 0.53 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD2 | 7 | 0.53 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 14 | 0.53 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 16 | 0.53 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 13 | 0.53 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 14 | 0.53 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HA | 19 | 0.53 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HA | 19 | 0.53 |
| (1,3612) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HA | 19 | 0.53 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 16 | 0.53 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 16 | 0.53 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 16 | 0.53 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 16 | 0.53 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 16 | 0.53 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 16 | 0.53 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 0.53 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 0.53 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 0.53 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 0.53 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 0.53 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 0.53 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 0.53 |
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3598) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 0.53 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 10 | 0.53 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 10 | 0.53 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 10 | 0.53 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD2 | 9 | 0.53 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD3 | 9 | 0.53 |
| (1,3505) | 1:A:106:ARG:HB2 | 1:A:132:PRO:HG2 | 6 | 0.53 |
| (1,3505) | 1:A:106:ARG:HB2 | 1:A:132:PRO:HG3 | 6 | 0.53 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 6 | 0.53 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD11 | 1 | 0.53 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD12 | 1 | 0.53 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD13 | 1 | 0.53 |
| (1,3081) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:169:THR:HB | 18 | 0.53 |
| (1,3043) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:171:ASN:HD22 | 4 | 0.53 |
| (1,3042) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:172:GLY:H | 7 | 0.53 |
| (1,2941) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:13:LYS:HA | 8 | 0.53 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 6 | 0.53 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:HA3 | 20 | 0.53 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:HA3 | 20 | 0.53 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:HA3 | 20 | 0.53 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB1 | 4 | 0.53 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB2 | 4 | 0.53 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB3 | 4 | 0.53 |
| (1,2576) | 1:A:59:ASN:HA | 1:A:129:ASN:HD21 | 18 | 0.53 |
| (1,2435) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:105:ASP:HB2 | 1 | 0.53 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB1 | 1:A:149:ASN:HD21 | 9 | 0.53 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB2 | 1:A:149:ASN:HD21 | 9 | 0.53 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB3 | 1:A:149:ASN:HD21 | 9 | 0.53 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 3 | 0.53 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 9 | 0.53 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 9 | 0.53 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 9 | 0.53 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:102:GLN:H | 2 | 0.53 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:102:GLN:H | 2 | 0.53 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:102:GLN:H | 2 | 0.53 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 18 | 0.53 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 18 | 0.53 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 18 | 0.53 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 18 | 0.53 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 18 | 0.53 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 18 | 0.53 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 18 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 18 | 0.53 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 18 | 0.53 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 6 | 0.53 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 6 | 0.53 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 6 | 0.53 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 2 | 0.53 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 2 | 0.53 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 2 | 0.53 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 2 | 0.53 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 2 | 0.53 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 2 | 0.53 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 6 | 0.53 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 6 | 0.53 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 6 | 0.53 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:59:ASN:HB3 | 2 | 0.53 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:59:ASN:HB3 | 2 | 0.53 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:59:ASN:HB3 | 2 | 0.53 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 12 | 0.53 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 12 | 0.53 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 12 | 0.53 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 12 | 0.53 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 12 | 0.53 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 12 | 0.53 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 13 | 0.53 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 13 | 0.53 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 13 | 0.53 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 13 | 0.53 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 13 | 0.53 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 13 | 0.53 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 15 | 0.53 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 15 | 0.53 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 15 | 0.53 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 19 | 0.53 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 19 | 0.53 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 19 | 0.53 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:H | 14 | 0.53 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:H | 14 | 0.53 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:H | 14 | 0.53 |
| (1,1609) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:124:LEU:HD11 | 18 | 0.53 |
| (1,1609) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:124:LEU:HD12 | 18 | 0.53 |
| (1,1609) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:124:LEU:HD13 | 18 | 0.53 |
| (1,1589) | 1:A:111:LEU:HA | 1:A:111:LEU:HD21 | 18 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1589) | 1:A:111:LEU:HA | 1:A:111:LEU:HD22 | 18 | 0.53 |
| (1,1589) | 1:A:111:LEU:HA | 1:A:111:LEU:HD23 | 18 | 0.53 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:ASN:H | 15 | 0.53 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:ASN:H | 15 | 0.53 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:ASN:H | 15 | 0.53 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 13 | 0.53 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 13 | 0.53 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 13 | 0.53 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 13 | 0.53 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 13 | 0.53 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 13 | 0.53 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 13 | 0.53 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 13 | 0.53 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 13 | 0.53 |
| (1,1080) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:GLY:HA3 | 3 | 0.53 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HD21 | 14 | 0.52 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HD21 | 14 | 0.52 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HD21 | 14 | 0.52 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 0.52 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 0.52 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 0.52 |
| (1,631) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:95:SER:H | 7 | 0.52 |
| (1,631) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:95:SER:H | 16 | 0.52 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 14 | 0.52 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 14 | 0.52 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 14 | 0.52 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 14 | 0.52 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 14 | 0.52 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 14 | 0.52 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 14 | 0.52 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 14 | 0.52 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG11 | 12 | 0.52 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG12 | 12 | 0.52 |
| (1,3763) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG13 | 12 | 0.52 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 5 | 0.52 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 17 | 0.52 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD2 | 8 | 0.52 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD3 | 8 | 0.52 |
| (1,3497) | 1:A:106:ARG:HB2 | 1:A:132:PRO:HD2 | 9 | 0.52 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 3 | 0.52 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 3 | 0.52 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 3 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 6 | 0.52 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 6 | 0.52 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 6 | 0.52 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 0.52 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 0.52 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 0.52 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 5 | 0.52 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG2 | 10 | 0.52 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG3 | 10 | 0.52 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 16 | 0.52 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 16 | 0.52 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 16 | 0.52 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB3 | 5 | 0.52 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB3 | 5 | 0.52 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB3 | 5 | 0.52 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD11 | 20 | 0.52 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD12 | 20 | 0.52 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD13 | 20 | 0.52 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG11 | 13 | 0.52 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG12 | 13 | 0.52 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG13 | 13 | 0.52 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG11 | 13 | 0.52 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG12 | 13 | 0.52 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG13 | 13 | 0.52 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 10 | 0.52 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE2 | 4 | 0.52 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE2 | 4 | 0.52 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE2 | 4 | 0.52 |
| (1,2791) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:46:GLY:HA2 | 7 | 0.52 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 3 | 0.52 |
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 11 | 0.52 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:H | 1 | 0.52 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:H | 1 | 0.52 |
| (1,240) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:H | 1 | 0.52 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 1 | 0.52 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 10 | 0.52 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 10 | 0.52 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 10 | 0.52 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 10 | 0.52 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 10 | 0.52 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 10 | 0.52 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 10 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 10 | 0.52 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 10 | 0.52 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 10 | 0.52 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:H | 6 | 0.52 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:H | 6 | 0.52 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:H | 6 | 0.52 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 3 | 0.52 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 3 | 0.52 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 3 | 0.52 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 3 | 0.52 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 3 | 0.52 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 3 | 0.52 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 17 | 0.52 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 17 | 0.52 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 17 | 0.52 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 17 | 0.52 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 17 | 0.52 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 17 | 0.52 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 19 | 0.52 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 19 | 0.52 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 19 | 0.52 |
| (1,1697) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:72:ALA:HA | 8 | 0.52 |
| (1,1697) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:72:ALA:HA | 8 | 0.52 |
| (1,1697) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:72:ALA:HA | 8 | 0.52 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 12 | 0.52 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 12 | 0.52 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 12 | 0.52 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 13 | 0.52 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 13 | 0.52 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 13 | 0.52 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 14 | 0.52 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 14 | 0.52 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 14 | 0.52 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 2 | 0.52 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 2 | 0.52 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 2 | 0.52 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 16 | 0.52 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 16 | 0.52 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 16 | 0.52 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HA | 18 | 0.52 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HA | 18 | 0.52 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HA | 18 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 10 | 0.51 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.51 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.51 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.51 |
| (1,631) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:95:SER:H | 10 | 0.51 |
| (1,631) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:95:SER:H | 15 | 0.51 |
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 11 | 0.51 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 7 | 0.51 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 7 | 0.51 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 7 | 0.51 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 6 | 0.51 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 6 | 0.51 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 6 | 0.51 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 2 | 0.51 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 2 | 0.51 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 2 | 0.51 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 2 | 0.51 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 2 | 0.51 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 2 | 0.51 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 15 | 0.51 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 15 | 0.51 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 15 | 0.51 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 15 | 0.51 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 15 | 0.51 |
| (1,3985) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 15 | 0.51 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG21 | 9 | 0.51 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG22 | 9 | 0.51 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG23 | 9 | 0.51 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 10 | 0.51 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 10 | 0.51 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 10 | 0.51 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 10 | 0.51 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 10 | 0.51 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 10 | 0.51 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 7 | 0.51 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 20 | 0.51 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 17 | 0.51 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 17 | 0.51 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 17 | 0.51 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 17 | 0.51 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 17 | 0.51 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 17 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3445) | 1:A:90:SER:H | 1:A:90:SER:HB2 | 2 | 0.51 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 16 | 0.51 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 16 | 0.51 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 16 | 0.51 |
| (1,3283) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:159:GLN:HG3 | 5 | 0.51 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 9 | 0.51 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 9 | 0.51 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 9 | 0.51 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 19 | 0.51 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:HA3 | 5 | 0.51 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:HA3 | 5 | 0.51 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:HA3 | 5 | 0.51 |
| (1,2540) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:152:ALA:HA | 1 | 0.51 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 17 | 0.51 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 17 | 0.51 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 17 | 0.51 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 20 | 0.51 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 20 | 0.51 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 20 | 0.51 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 2 | 0.51 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 2 | 0.51 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 2 | 0.51 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:H | 10 | 0.51 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:H | 10 | 0.51 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:H | 10 | 0.51 |
| (1,2105) | 1:A:9:THR:HA | 1:A:10:VAL:HG21 | 18 | 0.51 |
| (1,2105) | 1:A:9:THR:HA | 1:A:10:VAL:HG22 | 18 | 0.51 |
| (1,2105) | 1:A:9:THR:HA | 1:A:10:VAL:HG23 | 18 | 0.51 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 10 | 0.51 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 20 | 0.51 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 20 | 0.51 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 20 | 0.51 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 8 | 0.51 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 8 | 0.51 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 8 | 0.51 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 6 | 0.51 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 6 | 0.51 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 6 | 0.51 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 9 | 0.51 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 9 | 0.51 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 9 | 0.51 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 2 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 2 | 0.51 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 2 | 0.51 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 6 | 0.51 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 6 | 0.51 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 6 | 0.51 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 12 | 0.51 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 12 | 0.51 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 12 | 0.51 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 16 | 0.51 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 16 | 0.51 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 16 | 0.51 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:149:ASN:HA | 6 | 0.51 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:149:ASN:HA | 6 | 0.51 |
| (1,1649) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:149:ASN:HA | 6 | 0.51 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:H | 10 | 0.51 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:H | 10 | 0.51 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:H | 10 | 0.51 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 11 | 0.51 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 11 | 0.51 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 11 | 0.51 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 11 | 0.51 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 11 | 0.51 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 11 | 0.51 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 11 | 0.51 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 11 | 0.51 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 11 | 0.51 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 13 | 0.51 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 13 | 0.51 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 13 | 0.51 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 13 | 0.51 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 13 | 0.51 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 13 | 0.51 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 13 | 0.51 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 13 | 0.51 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 13 | 0.51 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 2 | 0.51 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 2 | 0.51 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 2 | 0.51 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 2 | 0.51 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 2 | 0.51 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 2 | 0.51 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HA | 17 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HA | 17 | 0.51 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HA | 17 | 0.51 |
| (1,957) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:171:ASN:HD21 | 6 | 0.5 |
| (1,841) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:84:ASN:HD22 | 4 | 0.5 |
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 20 | 0.5 |
| (1,631) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:95:SER:H | 13 | 0.5 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 14 | 0.5 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 14 | 0.5 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 14 | 0.5 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 17 | 0.5 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 17 | 0.5 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 17 | 0.5 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 3 | 0.5 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 3 | 0.5 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 3 | 0.5 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 8 | 0.5 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 8 | 0.5 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 8 | 0.5 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 16 | 0.5 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 16 | 0.5 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 16 | 0.5 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 1 | 0.5 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 1 | 0.5 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 5 | 0.5 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 5 | 0.5 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 7 | 0.5 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 8 | 0.5 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 0.5 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 0.5 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 0.5 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 0.5 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 0.5 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 0.5 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 0.5 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 0.5 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 0.5 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 13 | 0.5 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 13 | 0.5 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 13 | 0.5 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 13 | 0.5 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 13 | 0.5 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 13 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 19 | 0.5 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 19 | 0.5 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 19 | 0.5 |
| (1,3398) | 1:A:28:VAL:HA | 1:A:173:GLY:HA2 | 3 | 0.5 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 9 | 0.5 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 9 | 0.5 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 9 | 0.5 |
| (1,3056) | 1:A:69:ALA:H | 1:A:121:GLU:HG2 | 17 | 0.5 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG11 | 14 | 0.5 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG12 | 14 | 0.5 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG13 | 14 | 0.5 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG11 | 14 | 0.5 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG12 | 14 | 0.5 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG13 | 14 | 0.5 |
| (1,2677) | 1:A:28:VAL:HB | 1:A:173:GLY:HA2 | 3 | 0.5 |
| (1,2677) | 1:A:28:VAL:HB | 1:A:173:GLY:HA2 | 9 | 0.5 |
| (1,2572) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:129:ASN:HD22 | 4 | 0.5 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG21 | 19 | 0.5 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG22 | 19 | 0.5 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG23 | 19 | 0.5 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 6 | 0.5 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 6 | 0.5 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 6 | 0.5 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 16 | 0.5 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 16 | 0.5 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 16 | 0.5 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 0.5 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 0.5 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 0.5 |
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 14 | 0.5 |
| (1,2105) | 1:A:9:THR:HA | 1:A:10:VAL:HG21 | 19 | 0.5 |
| (1,2105) | 1:A:9:THR:HA | 1:A:10:VAL:HG22 | 19 | 0.5 |
| (1,2105) | 1:A:9:THR:HA | 1:A:10:VAL:HG23 | 19 | 0.5 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 1 | 0.5 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 1 | 0.5 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 1 | 0.5 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 2 | 0.5 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 2 | 0.5 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 2 | 0.5 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 2 | 0.5 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 2 | 0.5 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 2 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG21 | 4 | 0.5 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG22 | 4 | 0.5 |
| (1,1716) | 1:A:57:GLN:HE22 | 1:A:128:THR:HG23 | 4 | 0.5 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 2 | 0.5 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 2 | 0.5 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 2 | 0.5 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:H | 17 | 0.5 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:H | 17 | 0.5 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:H | 17 | 0.5 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 8 | 0.5 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 8 | 0.5 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 8 | 0.5 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 11 | 0.5 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 11 | 0.5 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 11 | 0.5 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 19 | 0.5 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 19 | 0.5 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 19 | 0.5 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 7 | 0.5 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 7 | 0.5 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 7 | 0.5 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 10 | 0.5 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 10 | 0.5 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 10 | 0.5 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 8 | 0.5 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 8 | 0.5 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 8 | 0.5 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 1 | 0.5 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 1 | 0.5 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 1 | 0.5 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 9 | 0.5 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 9 | 0.5 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 9 | 0.5 |
| (1,1373) | 1:A:104:LEU:H | 1:A:104:LEU:HD21 | 12 | 0.5 |
| (1,1373) | 1:A:104:LEU:H | 1:A:104:LEU:HD22 | 12 | 0.5 |
| (1,1373) | 1:A:104:LEU:H | 1:A:104:LEU:HD23 | 12 | 0.5 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 2 | 0.5 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 2 | 0.5 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 2 | 0.5 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 2 | 0.5 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 2 | 0.5 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 2 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 2 | 0.5 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 2 | 0.5 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 2 | 0.5 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 3 | 0.5 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 3 | 0.5 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 3 | 0.5 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 3 | 0.5 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 3 | 0.5 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 3 | 0.5 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 3 | 0.5 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 3 | 0.5 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 3 | 0.5 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:124:LEU:HD11 | 18 | 0.5 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:124:LEU:HD12 | 18 | 0.5 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:124:LEU:HD13 | 18 | 0.5 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:124:LEU:HD11 | 18 | 0.5 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:124:LEU:HD12 | 18 | 0.5 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:124:LEU:HD13 | 18 | 0.5 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:124:LEU:HD11 | 18 | 0.5 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:124:LEU:HD12 | 18 | 0.5 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:124:LEU:HD13 | 18 | 0.5 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 16 | 0.5 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 16 | 0.5 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 16 | 0.5 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 16 | 0.5 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 16 | 0.5 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 16 | 0.5 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 0.5 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 0.5 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 0.5 |
| (1,1238) | 1:A:35:GLY:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 6 | 0.5 |
| (1,1238) | 1:A:35:GLY:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 6 | 0.5 |
| (1,1238) | 1:A:35:GLY:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 6 | 0.5 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:153:THR:H | 7 | 0.5 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:153:THR:H | 7 | 0.5 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:153:THR:H | 7 | 0.5 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HD21 | 4 | 0.49 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HD21 | 4 | 0.49 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HD21 | 4 | 0.49 |
| (1,857) | 1:A:49:SER:H | 1:A:136:ARG:HD3 | 16 | 0.49 |
| (1,738) | 1:A:106:ARG:H | 1:A:106:ARG:HG3 | 4 | 0.49 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 15 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 15 | 0.49 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 15 | 0.49 |
| (1,631) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:95:SER:H | 12 | 0.49 |
| (1,3934) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:138:PHE:HZ | 9 | 0.49 |
| (1,3934) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:138:PHE:HZ | 14 | 0.49 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE1 | 10 | 0.49 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE2 | 10 | 0.49 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 4 | 0.49 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 4 | 0.49 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 9 | 0.49 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG13 | 10 | 0.49 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG13 | 10 | 0.49 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG13 | 10 | 0.49 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 4 | 0.49 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 11 | 0.49 |
| (1,3536) | 1:A:122:THR:HA | 1:A:124:LEU:HD21 | 18 | 0.49 |
| (1,3536) | 1:A:122:THR:HA | 1:A:124:LEU:HD22 | 18 | 0.49 |
| (1,3536) | 1:A:122:THR:HA | 1:A:124:LEU:HD23 | 18 | 0.49 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 2 | 0.49 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 2 | 0.49 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 2 | 0.49 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG21 | 12 | 0.49 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG22 | 12 | 0.49 |
| (1,3296) | 1:A:145:PRO:HB3 | 1:A:181:VAL:HG23 | 12 | 0.49 |
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 9 | 0.49 |
| (1,2987) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:66:ALA:H | 6 | 0.49 |
| (1,2966) | 1:A:5:VAL:HA | 1:A:6:ASN:HB2 | 14 | 0.49 |
| (1,2881) | 1:A:155:LYS:HE3 | 1:A:171:ASN:HD22 | 20 | 0.49 |
| (1,2864) | 1:A:89:GLN:HE21 | 1:A:178:LYS:HE3 | 15 | 0.49 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:102:GLN:H | 6 | 0.49 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:102:GLN:H | 6 | 0.49 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:102:GLN:H | 6 | 0.49 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG21 | 6 | 0.49 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG22 | 6 | 0.49 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG23 | 6 | 0.49 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG21 | 6 | 0.49 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG22 | 6 | 0.49 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG23 | 6 | 0.49 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG21 | 6 | 0.49 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG22 | 6 | 0.49 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG23 | 6 | 0.49 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 10 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 10 | 0.49 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 10 | 0.49 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:H | 20 | 0.49 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:H | 20 | 0.49 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:H | 20 | 0.49 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 6 | 0.49 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 1 | 0.49 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 1 | 0.49 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 1 | 0.49 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 3 | 0.49 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 3 | 0.49 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 3 | 0.49 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 11 | 0.49 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 11 | 0.49 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 11 | 0.49 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 19 | 0.49 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 19 | 0.49 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 19 | 0.49 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 19 | 0.49 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 19 | 0.49 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 19 | 0.49 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 6 | 0.49 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 6 | 0.49 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 6 | 0.49 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 10 | 0.49 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 10 | 0.49 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 10 | 0.49 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 10 | 0.49 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 10 | 0.49 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 10 | 0.49 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 18 | 0.49 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 18 | 0.49 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 18 | 0.49 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 3 | 0.49 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 3 | 0.49 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 3 | 0.49 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 17 | 0.49 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 17 | 0.49 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 17 | 0.49 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 15 | 0.49 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 15 | 0.49 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 15 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1588) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:119:SER:HA | 16 | 0.49 |
| (1,1588) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:119:SER:HA | 16 | 0.49 |
| (1,1588) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:119:SER:HA | 16 | 0.49 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 0.49 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 0.49 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 0.49 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 0.49 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 0.49 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 0.49 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 0.49 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 0.49 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 0.49 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 17 | 0.49 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 17 | 0.49 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 17 | 0.49 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 17 | 0.49 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 17 | 0.49 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 17 | 0.49 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 17 | 0.49 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 17 | 0.49 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 17 | 0.49 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:H | 15 | 0.49 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:H | 15 | 0.49 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:H | 15 | 0.49 |
| (1,1393) | 1:A:48:THR:HA | 1:A:138:PHE:HB3 | 14 | 0.49 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:HA | 13 | 0.49 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:HA | 13 | 0.49 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:HA | 13 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 1 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 1 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 1 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 1 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 1 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 1 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 1 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 1 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 1 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 4 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 4 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 4 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 4 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 4 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 4 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 4 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 4 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 4 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 6 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 6 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 6 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 6 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 6 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 6 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 6 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 6 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 6 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 17 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 17 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 17 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 17 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 17 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 17 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 17 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 17 | 0.49 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 17 | 0.49 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HA | 10 | 0.49 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HA | 10 | 0.49 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HA | 10 | 0.49 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 10 | 0.49 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 10 | 0.49 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 10 | 0.49 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 10 | 0.49 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 10 | 0.49 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 10 | 0.49 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 10 | 0.49 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 10 | 0.49 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 10 | 0.49 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 19 | 0.49 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 19 | 0.49 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 19 | 0.49 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 19 | 0.49 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 19 | 0.49 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 19 | 0.49 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HA | 16 | 0.49 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HA | 16 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HA | 16 | 0.49 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 0.49 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 0.49 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 0.49 |
| (1,1094) | 1:A:157:GLN:HB2 | 1:A:159:GLN:HE21 | 5 | 0.49 |
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 5 | 0.48 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 0.48 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 0.48 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 0.48 |
| (1,631) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:95:SER:H | 11 | 0.48 |
| (1,631) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:95:SER:H | 17 | 0.48 |
| (1,560) | 1:A:151:ASP:H | 1:A:151:ASP:HB2 | 6 | 0.48 |
| (1,560) | 1:A:151:ASP:H | 1:A:151:ASP:HB2 | 12 | 0.48 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 15 | 0.48 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 15 | 0.48 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 15 | 0.48 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 14 | 0.48 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 14 | 0.48 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 14 | 0.48 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE1 | 15 | 0.48 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE2 | 15 | 0.48 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 7 | 0.48 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HB | 10 | 0.48 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HB | 10 | 0.48 |
| (1,2962) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HB | 10 | 0.48 |
| (1,2728) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:14:GLY:HA3 | 1 | 0.48 |
| (1,2540) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:152:ALA:HA | 19 | 0.48 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 2 | 0.48 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 2 | 0.48 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 2 | 0.48 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 2 | 0.48 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB1 | 1:A:44:GLN:HB2 | 3 | 0.48 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB2 | 1:A:44:GLN:HB2 | 3 | 0.48 |
| (1,2237) | 1:A:43:ALA:HB3 | 1:A:44:GLN:HB2 | 3 | 0.48 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 11 | 0.48 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 11 | 0.48 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 11 | 0.48 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:102:GLN:H | 13 | 0.48 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:102:GLN:H | 13 | 0.48 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:102:GLN:H | 13 | 0.48 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:134:GLN:HE22 | 18 | 0.48 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:134:GLN:HE22 | 18 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:134:GLN:HE22 | 18 | 0.48 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 18 | 0.48 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 18 | 0.48 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 18 | 0.48 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 15 | 0.48 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 15 | 0.48 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 15 | 0.48 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:H | 17 | 0.48 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:H | 17 | 0.48 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:H | 17 | 0.48 |
| (1,2105) | 1:A:9:THR:HA | 1:A:10:VAL:HG21 | 16 | 0.48 |
| (1,2105) | 1:A:9:THR:HA | 1:A:10:VAL:HG22 | 16 | 0.48 |
| (1,2105) | 1:A:9:THR:HA | 1:A:10:VAL:HG23 | 16 | 0.48 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 13 | 0.48 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 13 | 0.48 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 13 | 0.48 |
| (1,1974) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:124:LEU:HD21 | 15 | 0.48 |
| (1,1974) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:124:LEU:HD22 | 15 | 0.48 |
| (1,1974) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:124:LEU:HD23 | 15 | 0.48 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG21 | 3 | 0.48 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG22 | 3 | 0.48 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG23 | 3 | 0.48 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG21 | 3 | 0.48 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG22 | 3 | 0.48 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG23 | 3 | 0.48 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG21 | 3 | 0.48 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG22 | 3 | 0.48 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG23 | 3 | 0.48 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 20 | 0.48 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 20 | 0.48 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 20 | 0.48 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 2 | 0.48 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 2 | 0.48 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 2 | 0.48 |
| (1,1725) | 1:A:59:ASN:HB2 | 1:A:128:THR:HG21 | 4 | 0.48 |
| (1,1725) | 1:A:59:ASN:HB2 | 1:A:128:THR:HG22 | 4 | 0.48 |
| (1,1725) | 1:A:59:ASN:HB2 | 1:A:128:THR:HG23 | 4 | 0.48 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 5 | 0.48 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 5 | 0.48 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 5 | 0.48 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 8 | 0.48 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 8 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 8 | 0.48 |
| (1,1697) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:72:ALA:HA | 11 | 0.48 |
| (1,1697) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:72:ALA:HA | 11 | 0.48 |
| (1,1697) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:72:ALA:HA | 11 | 0.48 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 13 | 0.48 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 13 | 0.48 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 13 | 0.48 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 13 | 0.48 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 13 | 0.48 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 13 | 0.48 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 13 | 0.48 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 13 | 0.48 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 13 | 0.48 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 7 | 0.48 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 7 | 0.48 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 7 | 0.48 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 4 | 0.48 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 4 | 0.48 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 4 | 0.48 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 17 | 0.48 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 17 | 0.48 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 17 | 0.48 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 3 | 0.48 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 3 | 0.48 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 3 | 0.48 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 18 | 0.48 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 18 | 0.48 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 18 | 0.48 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 12 | 0.48 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 12 | 0.48 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 12 | 0.48 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 3 | 0.48 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 3 | 0.48 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 3 | 0.48 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 3 | 0.48 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 3 | 0.48 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 3 | 0.48 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 3 | 0.48 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 3 | 0.48 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 3 | 0.48 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:HA | 13 | 0.48 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:HA | 13 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:HA | 13 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 10 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 10 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 10 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 10 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 10 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 10 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 10 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 10 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 10 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 18 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 18 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 18 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 18 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 18 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 18 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 18 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 18 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 18 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 19 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 19 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 19 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 19 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 19 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 19 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 19 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 19 | 0.48 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 19 | 0.48 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 15 | 0.48 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 15 | 0.48 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 15 | 0.48 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 15 | 0.48 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 15 | 0.48 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 15 | 0.48 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HA | 11 | 0.48 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HA | 11 | 0.48 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HA | 11 | 0.48 |
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 1 | 0.47 |
| (1,560) | 1:A:151:ASP:H | 1:A:151:ASP:HB2 | 4 | 0.47 |
| (1,560) | 1:A:151:ASP:H | 1:A:151:ASP:HB2 | 10 | 0.47 |
| (1,560) | 1:A:151:ASP:H | 1:A:151:ASP:HB2 | 18 | 0.47 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 1 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 5 | 0.47 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 8 | 0.47 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 9 | 0.47 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 3 | 0.47 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 3 | 0.47 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 3 | 0.47 |
| (1,420) | 1:A:73:PHE:H | 1:A:111:LEU:HD11 | 10 | 0.47 |
| (1,420) | 1:A:73:PHE:H | 1:A:111:LEU:HD12 | 10 | 0.47 |
| (1,420) | 1:A:73:PHE:H | 1:A:111:LEU:HD13 | 10 | 0.47 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 9 | 0.47 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 9 | 0.47 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 9 | 0.47 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE1 | 13 | 0.47 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE2 | 13 | 0.47 |
| (1,365) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:138:PHE:H | 4 | 0.47 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 18 | 0.47 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 19 | 0.47 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:33:GLN:HB3 | 12 | 0.47 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:33:GLN:HB3 | 12 | 0.47 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:33:GLN:HB3 | 12 | 0.47 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 6 | 0.47 |
| (1,3527) | 1:A:176:HIS:HB2 | 1:A:178:LYS:HE2 | 9 | 0.47 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG21 | 9 | 0.47 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG22 | 9 | 0.47 |
| (1,343) | 1:A:78:ILE:H | 1:A:85:VAL:HG23 | 9 | 0.47 |
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 2 | 0.47 |
| (1,3242) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HB | 6 | 0.47 |
| (1,3242) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HB | 8 | 0.47 |
| (1,3242) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HB | 15 | 0.47 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HB | 9 | 0.47 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HB | 9 | 0.47 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HB | 9 | 0.47 |
| (1,3042) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:172:GLY:H | 2 | 0.47 |
| (1,2987) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:66:ALA:H | 12 | 0.47 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:183:ASN:HB3 | 15 | 0.47 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:183:ASN:HB3 | 15 | 0.47 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:183:ASN:HB3 | 15 | 0.47 |
| (1,2881) | 1:A:155:LYS:HE3 | 1:A:171:ASN:HD22 | 10 | 0.47 |
| (1,2860) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:119:SER:HB3 | 3 | 0.47 |
| (1,2791) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:46:GLY:HA2 | 9 | 0.47 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG21 | 10 | 0.47 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG22 | 10 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG23 | 10 | 0.47 |
| (1,2435) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:105:ASP:HB2 | 11 | 0.47 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 3 | 0.47 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 3 | 0.47 |
| (1,2111) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 3 | 0.47 |
| (1,2083) | 1:A:155:LYS:HA | 1:A:172:GLY:HA2 | 8 | 0.47 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:H | 3 | 0.47 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:H | 3 | 0.47 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:H | 3 | 0.47 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 8 | 0.47 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 8 | 0.47 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 8 | 0.47 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 13 | 0.47 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 13 | 0.47 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 13 | 0.47 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 12 | 0.47 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 12 | 0.47 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 12 | 0.47 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:24:ASP:H | 5 | 0.47 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:24:ASP:H | 5 | 0.47 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:24:ASP:H | 5 | 0.47 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 2 | 0.47 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 2 | 0.47 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 2 | 0.47 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 17 | 0.47 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 17 | 0.47 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 17 | 0.47 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 1 | 0.47 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 1 | 0.47 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 1 | 0.47 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 13 | 0.47 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 13 | 0.47 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 13 | 0.47 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 0.47 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 0.47 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 0.47 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 0.47 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 0.47 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 0.47 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 0.47 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 0.47 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HA | 5 | 0.47 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HA | 5 | 0.47 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HA | 5 | 0.47 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HA | 7 | 0.47 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HA | 7 | 0.47 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HA | 7 | 0.47 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE22 | 5 | 0.47 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE22 | 5 | 0.47 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE22 | 5 | 0.47 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 16 | 0.47 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 16 | 0.47 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 16 | 0.47 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 16 | 0.47 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 16 | 0.47 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 16 | 0.47 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 16 | 0.47 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 16 | 0.47 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 16 | 0.47 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 3 | 0.47 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 3 | 0.47 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 3 | 0.47 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 8 | 0.47 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 8 | 0.47 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 8 | 0.47 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 14 | 0.47 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 14 | 0.47 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 14 | 0.47 |
| (1,1019) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:138:PHE:HB2 | 19 | 0.47 |
| (1,764) | 1:A:91:SER:H | 1:A:91:SER:HB3 | 7 | 0.46 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 9 | 0.46 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 9 | 0.46 |
| (1,68) | 1:A:25:ALA:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 9 | 0.46 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:54:PHE:H | 10 | 0.46 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:54:PHE:H | 10 | 0.46 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:54:PHE:H | 10 | 0.46 |
| (1,596) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:30:GLN:HG3 | 5 | 0.46 |
| (1,596) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:30:GLN:HG3 | 17 | 0.46 |
| (1,560) | 1:A:151:ASP:H | 1:A:151:ASP:HB2 | 1 | 0.46 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 2 | 0.46 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 14 | 0.46 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 20 | 0.46 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 20 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 20 | 0.46 |
| (1,420) | 1:A:73:PHE:H | 1:A:111:LEU:HD11 | 18 | 0.46 |
| (1,420) | 1:A:73:PHE:H | 1:A:111:LEU:HD12 | 18 | 0.46 |
| (1,420) | 1:A:73:PHE:H | 1:A:111:LEU:HD13 | 18 | 0.46 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 4 | 0.46 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 4 | 0.46 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 4 | 0.46 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 4 | 0.46 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 4 | 0.46 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 4 | 0.46 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 1 | 0.46 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 1 | 0.46 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 1 | 0.46 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 10 | 0.46 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 10 | 0.46 |
| (1,387) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:H | 7 | 0.46 |
| (1,387) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:H | 7 | 0.46 |
| (1,387) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:H | 7 | 0.46 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD1 | 17 | 0.46 |
| (1,3833) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HD2 | 17 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 0.46 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 0.46 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 18 | 0.46 |
| (1,3536) | 1:A:122:THR:HA | 1:A:124:LEU:HD21 | 13 | 0.46 |
| (1,3536) | 1:A:122:THR:HA | 1:A:124:LEU:HD22 | 13 | 0.46 |
| (1,3536) | 1:A:122:THR:HA | 1:A:124:LEU:HD23 | 13 | 0.46 |
| (1,3515) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:120:SER:HB3 | 16 | 0.46 |
| (1,3483) | 1:A:68:LYS:HD3 | 1:A:121:GLU:HG2 | 17 | 0.46 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 8 | 0.46 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 8 | 0.46 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 8 | 0.46 |
| (1,3328) | 1:A:62:ASP:HB2 | 1:A:65:VAL:HB | 19 | 0.46 |
| (1,3273) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:159:GLN:HG2 | 11 | 0.46 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG2 | 6 | 0.46 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG3 | 6 | 0.46 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 4 | 0.46 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 4 | 0.46 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 4 | 0.46 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB3 | 13 | 0.46 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB3 | 13 | 0.46 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB3 | 13 | 0.46 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD11 | 11 | 0.46 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD12 | 11 | 0.46 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD13 | 11 | 0.46 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG11 | 1 | 0.46 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG12 | 1 | 0.46 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG13 | 1 | 0.46 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG11 | 1 | 0.46 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG12 | 1 | 0.46 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG13 | 1 | 0.46 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 8 | 0.46 |
| (1,2729) | 1:A:14:GLY:HA2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 20 | 0.46 |
| (1,2540) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:152:ALA:HA | 10 | 0.46 |
| (1,2540) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:152:ALA:HA | 12 | 0.46 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG11 | 20 | 0.46 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG12 | 20 | 0.46 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG13 | 20 | 0.46 |
| (1,2419) | 1:A:129:ASN:HA | 1:A:129:ASN:HD22 | 3 | 0.46 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 15 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 15 | 0.46 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 15 | 0.46 |
| (1,1971) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:125:ASN:H | 10 | 0.46 |
| (1,1971) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:125:ASN:H | 10 | 0.46 |
| (1,1971) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:125:ASN:H | 10 | 0.46 |
| (1,1720) | 1:A:24:ASP:HA | 1:A:59:ASN:HB2 | 14 | 0.46 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 15 | 0.46 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 15 | 0.46 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 15 | 0.46 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 16 | 0.46 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 16 | 0.46 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 16 | 0.46 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 1 | 0.46 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 1 | 0.46 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 1 | 0.46 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 6 | 0.46 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 6 | 0.46 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 6 | 0.46 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:HA | 3 | 0.46 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:HA | 3 | 0.46 |
| (1,1676) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:HA | 3 | 0.46 |
| (1,158) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:113:LEU:H | 12 | 0.46 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 7 | 0.46 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 7 | 0.46 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 7 | 0.46 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 6 | 0.46 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 6 | 0.46 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 6 | 0.46 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:34:LEU:HD11 | 13 | 0.46 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:34:LEU:HD12 | 13 | 0.46 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:34:LEU:HD13 | 13 | 0.46 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:34:LEU:HD11 | 13 | 0.46 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:34:LEU:HD12 | 13 | 0.46 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:34:LEU:HD13 | 13 | 0.46 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:34:LEU:HD11 | 13 | 0.46 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:34:LEU:HD12 | 13 | 0.46 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:34:LEU:HD13 | 13 | 0.46 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 9 | 0.46 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE22 | 14 | 0.46 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE22 | 14 | 0.46 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE22 | 14 | 0.46 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 11 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 11 | 0.46 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 11 | 0.46 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 11 | 0.46 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 11 | 0.46 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 11 | 0.46 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 11 | 0.46 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 11 | 0.46 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 11 | 0.46 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 8 | 0.46 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 8 | 0.46 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 8 | 0.46 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 8 | 0.46 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 8 | 0.46 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 8 | 0.46 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 17 | 0.46 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 17 | 0.46 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 17 | 0.46 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 17 | 0.46 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 17 | 0.46 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 17 | 0.46 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 15 | 0.46 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 15 | 0.46 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 15 | 0.46 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:153:THR:H | 13 | 0.46 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:153:THR:H | 13 | 0.46 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:153:THR:H | 13 | 0.46 |
| (1,857) | 1:A:49:SER:H | 1:A:136:ARG:HD3 | 1 | 0.45 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 11 | 0.45 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 12 | 0.45 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 20 | 0.45 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 10 | 0.45 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 10 | 0.45 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 10 | 0.45 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 7 | 0.45 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 7 | 0.45 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 7 | 0.45 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 15 | 0.45 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 15 | 0.45 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 20 | 0.45 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 20 | 0.45 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 20 | 0.45 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 20 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 20 | 0.45 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 20 | 0.45 |
| (1,384) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:16:VAL:H | 11 | 0.45 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 5 | 0.45 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 8 | 0.45 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 8 | 0.45 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 8 | 0.45 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 6 | 0.45 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 12 | 0.45 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 4 | 0.45 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 12 | 0.45 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 6 | 0.45 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 6 | 0.45 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 6 | 0.45 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD2 | 3 | 0.45 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD3 | 3 | 0.45 |
| (1,3398) | 1:A:28:VAL:HA | 1:A:173:GLY:HA2 | 4 | 0.45 |
| (1,2801) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:HB2 | 4 | 0.45 |
| (1,2801) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:HB2 | 4 | 0.45 |
| (1,2801) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:HB2 | 4 | 0.45 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 9 | 0.45 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 9 | 0.45 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 9 | 0.45 |
| (1,2745) | 1:A:104:LEU:HB2 | 1:A:108:GLY:HA3 | 8 | 0.45 |
| (1,2728) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:14:GLY:HA3 | 20 | 0.45 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG11 | 8 | 0.45 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG12 | 8 | 0.45 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG13 | 8 | 0.45 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG11 | 8 | 0.45 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG12 | 8 | 0.45 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG13 | 8 | 0.45 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG11 | 8 | 0.45 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG12 | 8 | 0.45 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG13 | 8 | 0.45 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG11 | 15 | 0.45 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG12 | 15 | 0.45 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG13 | 15 | 0.45 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG11 | 15 | 0.45 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG12 | 15 | 0.45 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG13 | 15 | 0.45 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG11 | 15 | 0.45 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG12 | 15 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG13 | 15 | 0.45 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 1 | 0.45 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 1 | 0.45 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 1 | 0.45 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 2 | 0.45 |
| (1,2435) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:105:ASP:HB2 | 5 | 0.45 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 9 | 0.45 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 9 | 0.45 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 9 | 0.45 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG21 | 11 | 0.45 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG22 | 11 | 0.45 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG23 | 11 | 0.45 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG21 | 11 | 0.45 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG22 | 11 | 0.45 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG23 | 11 | 0.45 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG21 | 11 | 0.45 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG22 | 11 | 0.45 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG23 | 11 | 0.45 |
| (1,2352) | 1:A:96:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 0.45 |
| (1,2352) | 1:A:96:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 0.45 |
| (1,2352) | 1:A:96:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 0.45 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 11 | 0.45 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:H | 12 | 0.45 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:H | 12 | 0.45 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:H | 12 | 0.45 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 4 | 0.45 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 4 | 0.45 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 4 | 0.45 |
| (1,1971) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:125:ASN:H | 9 | 0.45 |
| (1,1971) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:125:ASN:H | 9 | 0.45 |
| (1,1971) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:125:ASN:H | 9 | 0.45 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 4 | 0.45 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 4 | 0.45 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 4 | 0.45 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 17 | 0.45 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 17 | 0.45 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 17 | 0.45 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG21 | 14 | 0.45 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG22 | 14 | 0.45 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG2 | 1:A:182:VAL:HG23 | 14 | 0.45 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 14 | 0.45 |
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 14 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1811) | 1:A:180:GLU:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 14 | 0.45 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 2 | 0.45 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 2 | 0.45 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 2 | 0.45 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 17 | 0.45 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 17 | 0.45 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 17 | 0.45 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:28:VAL:H | 3 | 0.45 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:28:VAL:H | 3 | 0.45 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:28:VAL:H | 3 | 0.45 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 20 | 0.45 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 20 | 0.45 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 20 | 0.45 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 19 | 0.45 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 19 | 0.45 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 19 | 0.45 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 20 | 0.45 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 20 | 0.45 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 20 | 0.45 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 4 | 0.45 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 4 | 0.45 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 4 | 0.45 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 9 | 0.45 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 9 | 0.45 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 9 | 0.45 |
| (1,1595) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:120:SER:H | 19 | 0.45 |
| (1,1595) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:120:SER:H | 19 | 0.45 |
| (1,1595) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:120:SER:H | 19 | 0.45 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 12 | 0.45 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 12 | 0.45 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 12 | 0.45 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 14 | 0.45 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 14 | 0.45 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 14 | 0.45 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 14 | 0.45 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 14 | 0.45 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 14 | 0.45 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 14 | 0.45 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 14 | 0.45 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 14 | 0.45 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 17 | 0.45 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 17 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 17 | 0.45 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 17 | 0.45 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 17 | 0.45 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 17 | 0.45 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 17 | 0.45 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 17 | 0.45 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 17 | 0.45 |
| (1,1316) | 1:A:27:SER:HA | 1:A:30:GLN:HG3 | 9 | 0.45 |
| (1,1312) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:124:LEU:HD11 | 13 | 0.45 |
| (1,1312) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:124:LEU:HD12 | 13 | 0.45 |
| (1,1312) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:124:LEU:HD13 | 13 | 0.45 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 11 | 0.45 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 11 | 0.45 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 11 | 0.45 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 4 | 0.45 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 4 | 0.45 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 4 | 0.45 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 0.45 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 0.45 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 0.45 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE21 | 3 | 0.45 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE21 | 3 | 0.45 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE21 | 3 | 0.45 |
| (1,1080) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:GLY:HA3 | 4 | 0.45 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 0.44 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 0.44 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 0.44 |
| (1,56) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:131:ILE:H | 13 | 0.44 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 7 | 0.44 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 9 | 0.44 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 9 | 0.44 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 9 | 0.44 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 20 | 0.44 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 20 | 0.44 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 20 | 0.44 |
| (1,3744) | 1:A:175:VAL:HA | 1:A:176:HIS:HB3 | 11 | 0.44 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 0.44 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 0.44 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 0.44 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 0.44 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 0.44 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 0.44 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 0.44 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 0.44 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 2 | 0.44 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 15 | 0.44 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 15 | 0.44 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 15 | 0.44 |
| (1,3513) | 1:A:106:ARG:HG3 | 1:A:120:SER:HB3 | 3 | 0.44 |
| (1,331) | 1:A:150:ALA:H | 1:A:178:LYS:HE3 | 7 | 0.44 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 12 | 0.44 |
| (1,3242) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HB | 14 | 0.44 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB2 | 15 | 0.44 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB2 | 15 | 0.44 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB2 | 15 | 0.44 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 14 | 0.44 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 16 | 0.44 |
| (1,2941) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:13:LYS:HA | 11 | 0.44 |
| (1,2924) | 1:A:59:ASN:HB2 | 1:A:128:THR:HA | 1 | 0.44 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE2 | 11 | 0.44 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE2 | 11 | 0.44 |
| (1,2888) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE2 | 11 | 0.44 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 2 | 0.44 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB1 | 18 | 0.44 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB2 | 18 | 0.44 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB3 | 18 | 0.44 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG11 | 2 | 0.44 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG12 | 2 | 0.44 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG13 | 2 | 0.44 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG11 | 2 | 0.44 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG12 | 2 | 0.44 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG13 | 2 | 0.44 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG11 | 2 | 0.44 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG12 | 2 | 0.44 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG13 | 2 | 0.44 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG11 | 4 | 0.44 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG12 | 4 | 0.44 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG13 | 4 | 0.44 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG11 | 4 | 0.44 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG12 | 4 | 0.44 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG13 | 4 | 0.44 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG11 | 4 | 0.44 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG12 | 4 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG13 | 4 | 0.44 |
| (1,2435) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:105:ASP:HB2 | 14 | 0.44 |
| (1,2435) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:105:ASP:HB2 | 20 | 0.44 |
| (1,2419) | 1:A:129:ASN:HA | 1:A:129:ASN:HD22 | 10 | 0.44 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB1 | 5 | 0.44 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB2 | 5 | 0.44 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB3 | 5 | 0.44 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB1 | 5 | 0.44 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB2 | 5 | 0.44 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB3 | 5 | 0.44 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB1 | 5 | 0.44 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB2 | 5 | 0.44 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB3 | 5 | 0.44 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB1 | 10 | 0.44 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB2 | 10 | 0.44 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB3 | 10 | 0.44 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB1 | 10 | 0.44 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB2 | 10 | 0.44 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB3 | 10 | 0.44 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB1 | 10 | 0.44 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB2 | 10 | 0.44 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB3 | 10 | 0.44 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 5 | 0.44 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 5 | 0.44 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 5 | 0.44 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 5 | 0.44 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 5 | 0.44 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 5 | 0.44 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 5 | 0.44 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 5 | 0.44 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 5 | 0.44 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 4 | 0.44 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 4 | 0.44 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 4 | 0.44 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:102:GLN:H | 3 | 0.44 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:102:GLN:H | 3 | 0.44 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:102:GLN:H | 3 | 0.44 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG11 | 6 | 0.44 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG12 | 6 | 0.44 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG13 | 6 | 0.44 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG21 | 6 | 0.44 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG22 | 6 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG23 | 6 | 0.44 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 1 | 0.44 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 1 | 0.44 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 1 | 0.44 |
| (1,1939) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HB3 | 9 | 0.44 |
| (1,1939) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HB3 | 9 | 0.44 |
| (1,1939) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HB3 | 9 | 0.44 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 12 | 0.44 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 12 | 0.44 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 12 | 0.44 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 18 | 0.44 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 18 | 0.44 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 18 | 0.44 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 15 | 0.44 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 15 | 0.44 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 15 | 0.44 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 18 | 0.44 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 18 | 0.44 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 18 | 0.44 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:24:ASP:H | 8 | 0.44 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:24:ASP:H | 8 | 0.44 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:24:ASP:H | 8 | 0.44 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:28:VAL:H | 7 | 0.44 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:28:VAL:H | 7 | 0.44 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:28:VAL:H | 7 | 0.44 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 10 | 0.44 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 10 | 0.44 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 10 | 0.44 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 10 | 0.44 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 10 | 0.44 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 10 | 0.44 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 10 | 0.44 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 10 | 0.44 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 10 | 0.44 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 11 | 0.44 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 11 | 0.44 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 11 | 0.44 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 17 | 0.44 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 17 | 0.44 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 17 | 0.44 |
| (1,1595) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:120:SER:H | 20 | 0.44 |
| (1,1595) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:120:SER:H | 20 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1595) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:120:SER:H | 20 | 0.44 |
| (1,1583) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:119:SER:H | 16 | 0.44 |
| (1,1583) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:119:SER:H | 16 | 0.44 |
| (1,1583) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:119:SER:H | 16 | 0.44 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB1 | 20 | 0.44 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB2 | 20 | 0.44 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB3 | 20 | 0.44 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB1 | 20 | 0.44 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB2 | 20 | 0.44 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB3 | 20 | 0.44 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB1 | 20 | 0.44 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB2 | 20 | 0.44 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB3 | 20 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 3 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 3 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 3 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 3 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 3 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 3 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 3 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 3 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 3 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 16 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 16 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 16 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 16 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 16 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 16 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 16 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 16 | 0.44 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 16 | 0.44 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 16 | 0.44 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 16 | 0.44 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 16 | 0.44 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 16 | 0.44 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 16 | 0.44 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 16 | 0.44 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 16 | 0.44 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 16 | 0.44 |
| (1,1481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 16 | 0.44 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 1 | 0.44 |
| (1,1393) | 1:A:48:THR:HA | 1:A:138:PHE:HB3 | 1 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:HA | 2 | 0.44 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:HA | 2 | 0.44 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:HA | 2 | 0.44 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 16 | 0.44 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 16 | 0.44 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 16 | 0.44 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HA | 3 | 0.44 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HA | 3 | 0.44 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HA | 3 | 0.44 |
| (1,985) | 1:A:61:CYS:HB3 | 1:A:127:GLY:H | 7 | 0.43 |
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 3 | 0.43 |
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 13 | 0.43 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 0.43 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 0.43 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 0.43 |
| (1,560) | 1:A:151:ASP:H | 1:A:151:ASP:HB2 | 8 | 0.43 |
| (1,560) | 1:A:151:ASP:H | 1:A:151:ASP:HB2 | 11 | 0.43 |
| (1,56) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:131:ILE:H | 1 | 0.43 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 3 | 0.43 |
| (1,3957) | 1:A:73:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG11 | 12 | 0.43 |
| (1,3957) | 1:A:73:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG12 | 12 | 0.43 |
| (1,3957) | 1:A:73:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG13 | 12 | 0.43 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 5 | 0.43 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 5 | 0.43 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 5 | 0.43 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 15 | 0.43 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 15 | 0.43 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 15 | 0.43 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 17 | 0.43 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 17 | 0.43 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 17 | 0.43 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HE1 | 18 | 0.43 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD11 | 1:A:133:PHE:HE2 | 18 | 0.43 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HE1 | 18 | 0.43 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD12 | 1:A:133:PHE:HE2 | 18 | 0.43 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HE1 | 18 | 0.43 |
| (1,3906) | 1:A:111:LEU:HD13 | 1:A:133:PHE:HE2 | 18 | 0.43 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 1 | 0.43 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 1 | 0.43 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 1 | 0.43 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 1 | 0.43 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 1 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 1 | 0.43 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:111:LEU:HD11 | 18 | 0.43 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:111:LEU:HD12 | 18 | 0.43 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:111:LEU:HD13 | 18 | 0.43 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:111:LEU:HD11 | 18 | 0.43 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:111:LEU:HD12 | 18 | 0.43 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:111:LEU:HD13 | 18 | 0.43 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:111:LEU:HD11 | 18 | 0.43 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:111:LEU:HD12 | 18 | 0.43 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:111:LEU:HD13 | 18 | 0.43 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 0.43 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 0.43 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 0.43 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 0.43 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 0.43 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 0.43 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 0.43 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 0.43 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 0.43 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 0.43 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 0.43 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 0.43 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 0.43 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 0.43 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 0.43 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 0.43 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 0.43 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 0.43 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 18 | 0.43 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 18 | 0.43 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 18 | 0.43 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 12 | 0.43 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 12 | 0.43 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 12 | 0.43 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 17 | 0.43 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 17 | 0.43 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 17 | 0.43 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 20 | 0.43 |
| (1,3283) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:159:GLN:HG3 | 8 | 0.43 |
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 20 | 0.43 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 2 | 0.43 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 2 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 2 | 0.43 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 4 | 0.43 |
| (1,295) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:18:ASN:HB2 | 6 | 0.43 |
| (1,2811) | 1:A:102:GLN:HA | 1:A:138:PHE:HB2 | 4 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG11 | 9 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG12 | 9 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG13 | 9 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG11 | 9 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG12 | 9 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG13 | 9 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG11 | 9 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG12 | 9 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG13 | 9 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG11 | 10 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG12 | 10 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG13 | 10 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG11 | 10 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG12 | 10 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG13 | 10 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG11 | 10 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG12 | 10 | 0.43 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG13 | 10 | 0.43 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG21 | 5 | 0.43 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG22 | 5 | 0.43 |
| (1,2522) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:71:VAL:HG23 | 5 | 0.43 |
| (1,2435) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:105:ASP:HB2 | 13 | 0.43 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB1 | 1:A:149:ASN:HD21 | 16 | 0.43 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB2 | 1:A:149:ASN:HD21 | 16 | 0.43 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB3 | 1:A:149:ASN:HD21 | 16 | 0.43 |
| (1,2314) | 1:A:157:GLN:HA | 1:A:158:TYR:HB3 | 17 | 0.43 |
| (1,229) | 1:A:165:GLY:HA2 | 1:A:166:ALA:H | 11 | 0.43 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 15 | 0.43 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 15 | 0.43 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 15 | 0.43 |
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 2 | 0.43 |
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 16 | 0.43 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG21 | 14 | 0.43 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG22 | 14 | 0.43 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG23 | 14 | 0.43 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG21 | 14 | 0.43 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG22 | 14 | 0.43 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG23 | 14 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG21 | 14 | 0.43 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG22 | 14 | 0.43 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG23 | 14 | 0.43 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG21 | 4 | 0.43 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG22 | 4 | 0.43 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG23 | 4 | 0.43 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 14 | 0.43 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 14 | 0.43 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 14 | 0.43 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 18 | 0.43 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 18 | 0.43 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 18 | 0.43 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 18 | 0.43 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 18 | 0.43 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 18 | 0.43 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 2 | 0.43 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 2 | 0.43 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 2 | 0.43 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 2 | 0.43 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 2 | 0.43 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 2 | 0.43 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 2 | 0.43 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 2 | 0.43 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 2 | 0.43 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 5 | 0.43 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 5 | 0.43 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 5 | 0.43 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 5 | 0.43 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 5 | 0.43 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 5 | 0.43 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 5 | 0.43 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 5 | 0.43 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 5 | 0.43 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 5 | 0.43 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 5 | 0.43 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 5 | 0.43 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 13 | 0.43 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 13 | 0.43 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 13 | 0.43 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 7 | 0.43 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 7 | 0.43 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 7 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 9 | 0.43 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 9 | 0.43 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 9 | 0.43 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 14 | 0.43 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 14 | 0.43 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 14 | 0.43 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 15 | 0.43 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 15 | 0.43 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 15 | 0.43 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:H | 18 | 0.43 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:H | 18 | 0.43 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:H | 18 | 0.43 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB1 | 19 | 0.43 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB2 | 19 | 0.43 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB3 | 19 | 0.43 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB1 | 19 | 0.43 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB2 | 19 | 0.43 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB3 | 19 | 0.43 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB1 | 19 | 0.43 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB2 | 19 | 0.43 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB3 | 19 | 0.43 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 0.43 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 0.43 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 0.43 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 0.43 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 0.43 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 0.43 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 0.43 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 0.43 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 0.43 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 0.43 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 0.43 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 0.43 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 3 | 0.43 |
| (1,1393) | 1:A:48:THR:HA | 1:A:138:PHE:HB3 | 11 | 0.43 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 7 | 0.43 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 7 | 0.43 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 7 | 0.43 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 7 | 0.43 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 7 | 0.43 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 7 | 0.43 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 7 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 7 | 0.43 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 7 | 0.43 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 5 | 0.43 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 5 | 0.43 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 5 | 0.43 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 5 | 0.43 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 5 | 0.43 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 5 | 0.43 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 5 | 0.43 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 5 | 0.43 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 5 | 0.43 |
| (1,1310) | 1:A:67:SER:HA | 1:A:124:LEU:HD11 | 18 | 0.43 |
| (1,1310) | 1:A:67:SER:HA | 1:A:124:LEU:HD12 | 18 | 0.43 |
| (1,1310) | 1:A:67:SER:HA | 1:A:124:LEU:HD13 | 18 | 0.43 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HA | 3 | 0.43 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HA | 3 | 0.43 |
| (1,1304) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HA | 3 | 0.43 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 17 | 0.43 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 17 | 0.43 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 17 | 0.43 |
| (1,985) | 1:A:61:CYS:HB3 | 1:A:127:GLY:H | 9 | 0.42 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 15 | 0.42 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 0.42 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 0.42 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 0.42 |
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 19 | 0.42 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 13 | 0.42 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 17 | 0.42 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 19 | 0.42 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 13 | 0.42 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 13 | 0.42 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 13 | 0.42 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 3 | 0.42 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 3 | 0.42 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 3 | 0.42 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 3 | 0.42 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 3 | 0.42 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 3 | 0.42 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 6 | 0.42 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 6 | 0.42 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 6 | 0.42 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 17 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 17 | 0.42 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 17 | 0.42 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 17 | 0.42 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 17 | 0.42 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 17 | 0.42 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 19 | 0.42 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 19 | 0.42 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 19 | 0.42 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 19 | 0.42 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 19 | 0.42 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 19 | 0.42 |
| (1,3776) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HG21 | 17 | 0.42 |
| (1,3776) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HG22 | 17 | 0.42 |
| (1,3776) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HG23 | 17 | 0.42 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:111:LEU:HD11 | 10 | 0.42 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:111:LEU:HD12 | 10 | 0.42 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:111:LEU:HD13 | 10 | 0.42 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:111:LEU:HD11 | 10 | 0.42 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:111:LEU:HD12 | 10 | 0.42 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:111:LEU:HD13 | 10 | 0.42 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:111:LEU:HD11 | 10 | 0.42 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:111:LEU:HD12 | 10 | 0.42 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:111:LEU:HD13 | 10 | 0.42 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:111:LEU:HD11 | 20 | 0.42 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:111:LEU:HD12 | 20 | 0.42 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:111:LEU:HD13 | 20 | 0.42 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:111:LEU:HD11 | 20 | 0.42 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:111:LEU:HD12 | 20 | 0.42 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:111:LEU:HD13 | 20 | 0.42 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:111:LEU:HD11 | 20 | 0.42 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:111:LEU:HD12 | 20 | 0.42 |
| (1,3718) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:111:LEU:HD13 | 20 | 0.42 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 0.42 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 0.42 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 0.42 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 0.42 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 0.42 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 0.42 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 0.42 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 0.42 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 0.42 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 8 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 5 | 0.42 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 5 | 0.42 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 5 | 0.42 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 7 | 0.42 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 7 | 0.42 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 7 | 0.42 |
| (1,3564) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HA | 11 | 0.42 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 8 | 0.42 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 8 | 0.42 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 8 | 0.42 |
| (1,3522) | 1:A:120:SER:HB3 | 1:A:121:GLU:H | 11 | 0.42 |
| (1,3486) | 1:A:78:ILE:HG12 | 1:A:79:ASP:HB3 | 19 | 0.42 |
| (1,3283) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:159:GLN:HG3 | 12 | 0.42 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG21 | 5 | 0.42 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG22 | 5 | 0.42 |
| (1,3179) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:182:VAL:HG23 | 5 | 0.42 |
| (1,3052) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:121:GLU:HG3 | 9 | 0.42 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB2 | 20 | 0.42 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB2 | 20 | 0.42 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB2 | 20 | 0.42 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG11 | 20 | 0.42 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG12 | 20 | 0.42 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG13 | 20 | 0.42 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG11 | 20 | 0.42 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG12 | 20 | 0.42 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG13 | 20 | 0.42 |
| (1,295) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:18:ASN:HB2 | 16 | 0.42 |
| (1,2850) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:133:PHE:H | 6 | 0.42 |
| (1,2791) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:46:GLY:HA2 | 20 | 0.42 |
| (1,2709) | 1:A:73:PHE:HA | 1:A:74:LEU:HB2 | 10 | 0.42 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG11 | 5 | 0.42 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG12 | 5 | 0.42 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG13 | 5 | 0.42 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG11 | 5 | 0.42 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG12 | 5 | 0.42 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG13 | 5 | 0.42 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG11 | 5 | 0.42 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG12 | 5 | 0.42 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG13 | 5 | 0.42 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG11 | 19 | 0.42 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG12 | 19 | 0.42 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG13 | 19 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG11 | 19 | 0.42 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG12 | 19 | 0.42 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG13 | 19 | 0.42 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG11 | 19 | 0.42 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG12 | 19 | 0.42 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG13 | 19 | 0.42 |
| (1,2540) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:152:ALA:HA | 2 | 0.42 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG11 | 19 | 0.42 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG12 | 19 | 0.42 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG13 | 19 | 0.42 |
| (1,2435) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:105:ASP:HB2 | 8 | 0.42 |
| (1,2435) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:105:ASP:HB2 | 9 | 0.42 |
| (1,2398) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:110:ALA:HB1 | 3 | 0.42 |
| (1,2398) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:110:ALA:HB2 | 3 | 0.42 |
| (1,2398) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:110:ALA:HB3 | 3 | 0.42 |
| (1,229) | 1:A:165:GLY:HA2 | 1:A:166:ALA:H | 8 | 0.42 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB1 | 13 | 0.42 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB2 | 13 | 0.42 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB3 | 13 | 0.42 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB1 | 13 | 0.42 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB2 | 13 | 0.42 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB3 | 13 | 0.42 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB1 | 13 | 0.42 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB2 | 13 | 0.42 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB3 | 13 | 0.42 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB1 | 3 | 0.42 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB2 | 3 | 0.42 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:47:ALA:HB3 | 3 | 0.42 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB1 | 3 | 0.42 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB2 | 3 | 0.42 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:47:ALA:HB3 | 3 | 0.42 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB1 | 3 | 0.42 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB2 | 3 | 0.42 |
| (1,2236) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:47:ALA:HB3 | 3 | 0.42 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 13 | 0.42 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 13 | 0.42 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 13 | 0.42 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:134:GLN:HE22 | 14 | 0.42 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:134:GLN:HE22 | 14 | 0.42 |
| (1,2209) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:134:GLN:HE22 | 14 | 0.42 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 0.42 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 0.42 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 18 | 0.42 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 18 | 0.42 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 18 | 0.42 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG21 | 15 | 0.42 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG22 | 15 | 0.42 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG23 | 15 | 0.42 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG21 | 15 | 0.42 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG22 | 15 | 0.42 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG23 | 15 | 0.42 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG21 | 15 | 0.42 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG22 | 15 | 0.42 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG23 | 15 | 0.42 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 14 | 0.42 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 14 | 0.42 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 14 | 0.42 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 7 | 0.42 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 7 | 0.42 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 7 | 0.42 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG21 | 7 | 0.42 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG22 | 7 | 0.42 |
| (1,1772) | 1:A:32:VAL:HB | 1:A:175:VAL:HG23 | 7 | 0.42 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 2 | 0.42 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 2 | 0.42 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 2 | 0.42 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 3 | 0.42 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 3 | 0.42 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 3 | 0.42 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 6 | 0.42 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 6 | 0.42 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 6 | 0.42 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 15 | 0.42 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 15 | 0.42 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 15 | 0.42 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 17 | 0.42 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 17 | 0.42 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 17 | 0.42 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 7 | 0.42 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 7 | 0.42 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 7 | 0.42 |
| (1,1697) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:72:ALA:HA | 2 | 0.42 |
| (1,1697) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:72:ALA:HA | 2 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1697) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:72:ALA:HA | 2 | 0.42 |
| (1,1690) | 1:A:144:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 19 | 0.42 |
| (1,1690) | 1:A:144:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 19 | 0.42 |
| (1,1690) | 1:A:144:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 19 | 0.42 |
| (1,1589) | 1:A:111:LEU:HA | 1:A:111:LEU:HD21 | 10 | 0.42 |
| (1,1589) | 1:A:111:LEU:HA | 1:A:111:LEU:HD22 | 10 | 0.42 |
| (1,1589) | 1:A:111:LEU:HA | 1:A:111:LEU:HD23 | 10 | 0.42 |
| (1,1589) | 1:A:111:LEU:HA | 1:A:111:LEU:HD21 | 19 | 0.42 |
| (1,1589) | 1:A:111:LEU:HA | 1:A:111:LEU:HD22 | 19 | 0.42 |
| (1,1589) | 1:A:111:LEU:HA | 1:A:111:LEU:HD23 | 19 | 0.42 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 0.42 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 0.42 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 0.42 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:H | 2 | 0.42 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:H | 2 | 0.42 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:H | 2 | 0.42 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 10 | 0.42 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 6 | 0.42 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 6 | 0.42 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 6 | 0.42 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 6 | 0.42 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 6 | 0.42 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 6 | 0.42 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 6 | 0.42 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 6 | 0.42 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 6 | 0.42 |
| (1,942) | 1:A:24:ASP:HB2 | 1:A:27:SER:H | 17 | 0.41 |
| (1,714) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:168:THR:H | 7 | 0.41 |
| (1,56) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:131:ILE:H | 6 | 0.41 |
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 8 | 0.41 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 13 | 0.41 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 13 | 0.41 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 13 | 0.41 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 18 | 0.41 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 18 | 0.41 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 18 | 0.41 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 18 | 0.41 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 18 | 0.41 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 18 | 0.41 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 15 | 0.41 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 15 | 0.41 |
| (1,3778) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HB | 6 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG13 | 18 | 0.41 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG13 | 18 | 0.41 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG13 | 18 | 0.41 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 9 | 0.41 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 2 | 0.41 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 2 | 0.41 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 2 | 0.41 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 2 | 0.41 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 2 | 0.41 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 2 | 0.41 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 9 | 0.41 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 9 | 0.41 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 9 | 0.41 |
| (1,3518) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:133:PHE:HE1 | 9 | 0.41 |
| (1,3518) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:133:PHE:HE2 | 9 | 0.41 |
| (1,3390) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:94:GLY:H | 7 | 0.41 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 10 | 0.41 |
| (1,3242) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HB | 7 | 0.41 |
| (1,3042) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:172:GLY:H | 16 | 0.41 |
| (1,2987) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:66:ALA:H | 2 | 0.41 |
| (1,2942) | 1:A:49:SER:HA | 1:A:137:TYR:HB3 | 9 | 0.41 |
| (1,2804) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HB3 | 14 | 0.41 |
| (1,2780) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA2 | 1 | 0.41 |
| (1,2728) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:14:GLY:HA3 | 13 | 0.41 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG11 | 17 | 0.41 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG12 | 17 | 0.41 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG13 | 17 | 0.41 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG11 | 17 | 0.41 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG12 | 17 | 0.41 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG13 | 17 | 0.41 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG11 | 17 | 0.41 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG12 | 17 | 0.41 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG13 | 17 | 0.41 |
| (1,2682) | 1:A:162:GLY:HA2 | 1:A:164:GLY:H | 16 | 0.41 |
| (1,2540) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:152:ALA:HA | 18 | 0.41 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG11 | 13 | 0.41 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG12 | 13 | 0.41 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG13 | 13 | 0.41 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB1 | 1:A:149:ASN:HD21 | 2 | 0.41 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB2 | 1:A:149:ASN:HD21 | 2 | 0.41 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB3 | 1:A:149:ASN:HD21 | 2 | 0.41 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB1 | 4 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB2 | 4 | 0.41 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB3 | 4 | 0.41 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB1 | 4 | 0.41 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB2 | 4 | 0.41 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB3 | 4 | 0.41 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB1 | 4 | 0.41 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB2 | 4 | 0.41 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB3 | 4 | 0.41 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:H | 2 | 0.41 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:H | 2 | 0.41 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:H | 2 | 0.41 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:H | 9 | 0.41 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:H | 9 | 0.41 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:H | 9 | 0.41 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG11 | 4 | 0.41 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG12 | 4 | 0.41 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG13 | 4 | 0.41 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG21 | 4 | 0.41 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG22 | 4 | 0.41 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG23 | 4 | 0.41 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG21 | 8 | 0.41 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG22 | 8 | 0.41 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG23 | 8 | 0.41 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG21 | 8 | 0.41 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG22 | 8 | 0.41 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG23 | 8 | 0.41 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG21 | 8 | 0.41 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG22 | 8 | 0.41 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG23 | 8 | 0.41 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG21 | 13 | 0.41 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG22 | 13 | 0.41 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:52:VAL:HG23 | 13 | 0.41 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG21 | 13 | 0.41 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG22 | 13 | 0.41 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:52:VAL:HG23 | 13 | 0.41 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG21 | 13 | 0.41 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG22 | 13 | 0.41 |
| (1,2064) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:52:VAL:HG23 | 13 | 0.41 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 9 | 0.41 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 9 | 0.41 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 9 | 0.41 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE21 | 15 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE21 | 15 | 0.41 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE21 | 15 | 0.41 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE22 | 15 | 0.41 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE22 | 15 | 0.41 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE22 | 15 | 0.41 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 8 | 0.41 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 8 | 0.41 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 8 | 0.41 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG21 | 2 | 0.41 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG22 | 2 | 0.41 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG23 | 2 | 0.41 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG21 | 2 | 0.41 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG22 | 2 | 0.41 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG23 | 2 | 0.41 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG21 | 2 | 0.41 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG22 | 2 | 0.41 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG23 | 2 | 0.41 |
| (1,1769) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HG21 | 9 | 0.41 |
| (1,1769) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HG22 | 9 | 0.41 |
| (1,1769) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HG23 | 9 | 0.41 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 1 | 0.41 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 1 | 0.41 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 1 | 0.41 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 4 | 0.41 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 4 | 0.41 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 4 | 0.41 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 15 | 0.41 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 15 | 0.41 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 15 | 0.41 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB1 | 11 | 0.41 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB2 | 11 | 0.41 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB3 | 11 | 0.41 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB1 | 11 | 0.41 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB2 | 11 | 0.41 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB3 | 11 | 0.41 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB1 | 11 | 0.41 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB2 | 11 | 0.41 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB3 | 11 | 0.41 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:34:LEU:HD11 | 6 | 0.41 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:34:LEU:HD12 | 6 | 0.41 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:34:LEU:HD13 | 6 | 0.41 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:34:LEU:HD11 | 6 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:34:LEU:HD12 | 6 | 0.41 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:34:LEU:HD13 | 6 | 0.41 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:34:LEU:HD11 | 6 | 0.41 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:34:LEU:HD12 | 6 | 0.41 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:34:LEU:HD13 | 6 | 0.41 |
| (1,1467) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:LYS:HG2 | 7 | 0.41 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 17 | 0.41 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:HA | 7 | 0.41 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:HA | 7 | 0.41 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:HA | 7 | 0.41 |
| (1,1316) | 1:A:27:SER:HA | 1:A:30:GLN:HG3 | 14 | 0.41 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 9 | 0.41 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 9 | 0.41 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 9 | 0.41 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 18 | 0.41 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 18 | 0.41 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 18 | 0.41 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 18 | 0.41 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 18 | 0.41 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 18 | 0.41 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 18 | 0.41 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 18 | 0.41 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 18 | 0.41 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HA | 2 | 0.41 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HA | 2 | 0.41 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HA | 2 | 0.41 |
| (1,1106) | 1:A:74:LEU:HB3 | 1:A:115:GLY:H | 16 | 0.41 |
| (1,1042) | 1:A:98:ASN:HD21 | 1:A:141:GLY:HA2 | 2 | 0.41 |
| (1,942) | 1:A:24:ASP:HB2 | 1:A:27:SER:H | 6 | 0.4 |
| (1,927) | 1:A:79:ASP:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 19 | 0.4 |
| (1,927) | 1:A:79:ASP:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 19 | 0.4 |
| (1,927) | 1:A:79:ASP:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 19 | 0.4 |
| (1,857) | 1:A:49:SER:H | 1:A:136:ARG:HD3 | 6 | 0.4 |
| (1,857) | 1:A:49:SER:H | 1:A:136:ARG:HD3 | 15 | 0.4 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 13 | 0.4 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 0.4 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 0.4 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 0.4 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 6 | 0.4 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 18 | 0.4 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 18 | 0.4 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 18 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 2 | 0.4 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 2 | 0.4 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 2 | 0.4 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE1 | 9 | 0.4 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE2 | 9 | 0.4 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 16 | 0.4 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 6 | 0.4 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 6 | 0.4 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 6 | 0.4 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 6 | 0.4 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 6 | 0.4 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 6 | 0.4 |
| (1,3390) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:94:GLY:H | 5 | 0.4 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB3 | 19 | 0.4 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB3 | 19 | 0.4 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB3 | 19 | 0.4 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 12 | 0.4 |
| (1,2791) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:46:GLY:HA2 | 18 | 0.4 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB3 | 2 | 0.4 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB3 | 2 | 0.4 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB3 | 2 | 0.4 |
| (1,2435) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:105:ASP:HB2 | 15 | 0.4 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB1 | 1:A:149:ASN:HD21 | 20 | 0.4 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB2 | 1:A:149:ASN:HD21 | 20 | 0.4 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB3 | 1:A:149:ASN:HD21 | 20 | 0.4 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:102:GLN:H | 18 | 0.4 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:102:GLN:H | 18 | 0.4 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:102:GLN:H | 18 | 0.4 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG21 | 10 | 0.4 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG22 | 10 | 0.4 |
| (1,2113) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:156:VAL:HG23 | 10 | 0.4 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 19 | 0.4 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 19 | 0.4 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 19 | 0.4 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG21 | 8 | 0.4 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG22 | 8 | 0.4 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG23 | 8 | 0.4 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG21 | 13 | 0.4 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG22 | 13 | 0.4 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG23 | 13 | 0.4 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 19 | 0.4 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 19 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 19 | 0.4 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG21 | 5 | 0.4 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG22 | 5 | 0.4 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG23 | 5 | 0.4 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG21 | 5 | 0.4 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG22 | 5 | 0.4 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG23 | 5 | 0.4 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG21 | 5 | 0.4 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG22 | 5 | 0.4 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG23 | 5 | 0.4 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 1 | 0.4 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 1 | 0.4 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 1 | 0.4 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 1 | 0.4 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 1 | 0.4 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 1 | 0.4 |
| (1,1763) | 1:A:152:ALA:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 8 | 0.4 |
| (1,1763) | 1:A:152:ALA:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 8 | 0.4 |
| (1,1763) | 1:A:152:ALA:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 8 | 0.4 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 4 | 0.4 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 4 | 0.4 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 4 | 0.4 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 13 | 0.4 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 13 | 0.4 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 13 | 0.4 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 8 | 0.4 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 8 | 0.4 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 8 | 0.4 |
| (1,158) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:113:LEU:H | 15 | 0.4 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 2 | 0.4 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD3 | 18 | 0.4 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD3 | 18 | 0.4 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD3 | 18 | 0.4 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD2 | 18 | 0.4 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD2 | 18 | 0.4 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD2 | 18 | 0.4 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 5 | 0.4 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 5 | 0.4 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 5 | 0.4 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 5 | 0.4 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 5 | 0.4 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 5 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 5 | 0.4 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 5 | 0.4 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 5 | 0.4 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 8 | 0.4 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 8 | 0.4 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 8 | 0.4 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 8 | 0.4 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 8 | 0.4 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 8 | 0.4 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 8 | 0.4 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 8 | 0.4 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 8 | 0.4 |
| (1,1323) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:118:PHE:HA | 20 | 0.4 |
| (1,1323) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:118:PHE:HA | 20 | 0.4 |
| (1,1323) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:118:PHE:HA | 20 | 0.4 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 18 | 0.4 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 18 | 0.4 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 18 | 0.4 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 18 | 0.4 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 18 | 0.4 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 18 | 0.4 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 0.4 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 0.4 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 0.4 |
| (1,1215) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 1 | 0.4 |
| (1,1215) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 1 | 0.4 |
| (1,1215) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 1 | 0.4 |
| (1,1019) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:138:PHE:HB2 | 12 | 0.4 |
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 7 | 0.39 |
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 16 | 0.39 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 0.39 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 0.39 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 0.39 |
| (1,750) | 1:A:133:PHE:HB2 | 1:A:134:GLN:H | 20 | 0.39 |
| (1,560) | 1:A:151:ASP:H | 1:A:151:ASP:HB2 | 5 | 0.39 |
| (1,560) | 1:A:151:ASP:H | 1:A:151:ASP:HB2 | 19 | 0.39 |
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 18 | 0.39 |
| (1,502) | 1:A:16:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:H | 14 | 0.39 |
| (1,502) | 1:A:16:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:H | 14 | 0.39 |
| (1,502) | 1:A:16:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:H | 14 | 0.39 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 6 | 0.39 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 6 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 6 | 0.39 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 16 | 0.39 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 16 | 0.39 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 16 | 0.39 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 18 | 0.39 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 18 | 0.39 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 18 | 0.39 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 19 | 0.39 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 19 | 0.39 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 19 | 0.39 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 12 | 0.39 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 12 | 0.39 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 20 | 0.39 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 4 | 0.39 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 1 | 0.39 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 1 | 0.39 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 1 | 0.39 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 1 | 0.39 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 1 | 0.39 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 1 | 0.39 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 7 | 0.39 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 7 | 0.39 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 7 | 0.39 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 7 | 0.39 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 7 | 0.39 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 7 | 0.39 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 8 | 0.39 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 8 | 0.39 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 8 | 0.39 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 8 | 0.39 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 8 | 0.39 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 8 | 0.39 |
| (1,3564) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HA | 7 | 0.39 |
| (1,3524) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:120:SER:HB2 | 10 | 0.39 |
| (1,3524) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:120:SER:HB2 | 10 | 0.39 |
| (1,3524) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:120:SER:HB2 | 10 | 0.39 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 17 | 0.39 |
| (1,3273) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:159:GLN:HG2 | 15 | 0.39 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 6 | 0.39 |
| (1,3052) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:121:GLU:HG3 | 17 | 0.39 |
| (1,2791) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:46:GLY:HA2 | 3 | 0.39 |
| (1,2540) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:152:ALA:HA | 4 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2419) | 1:A:129:ASN:HA | 1:A:129:ASN:HD22 | 18 | 0.39 |
| (1,2317) | 1:A:44:GLN:HA | 1:A:141:GLY:HA3 | 19 | 0.39 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG21 | 12 | 0.39 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG22 | 12 | 0.39 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG23 | 12 | 0.39 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG21 | 12 | 0.39 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG22 | 12 | 0.39 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG23 | 12 | 0.39 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG21 | 12 | 0.39 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG22 | 12 | 0.39 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG23 | 12 | 0.39 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:H | 15 | 0.39 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:H | 15 | 0.39 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:H | 15 | 0.39 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 15 | 0.39 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 15 | 0.39 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 15 | 0.39 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 19 | 0.39 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 19 | 0.39 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 19 | 0.39 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE21 | 5 | 0.39 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE21 | 5 | 0.39 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE21 | 5 | 0.39 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE22 | 5 | 0.39 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE22 | 5 | 0.39 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE22 | 5 | 0.39 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 15 | 0.39 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 15 | 0.39 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 15 | 0.39 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:59:ASN:HB3 | 19 | 0.39 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:59:ASN:HB3 | 19 | 0.39 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:59:ASN:HB3 | 19 | 0.39 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG21 | 19 | 0.39 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG22 | 19 | 0.39 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG23 | 19 | 0.39 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG21 | 1 | 0.39 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG22 | 1 | 0.39 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG23 | 1 | 0.39 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG21 | 1 | 0.39 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG22 | 1 | 0.39 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG23 | 1 | 0.39 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG21 | 1 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG22 | 1 | 0.39 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG23 | 1 | 0.39 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:59:ASN:H | 18 | 0.39 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:59:ASN:H | 18 | 0.39 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:59:ASN:H | 18 | 0.39 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:86:LEU:H | 3 | 0.39 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:86:LEU:H | 3 | 0.39 |
| (1,1707) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:86:LEU:H | 3 | 0.39 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 8 | 0.39 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 8 | 0.39 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 8 | 0.39 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 8 | 0.39 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 8 | 0.39 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 8 | 0.39 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 8 | 0.39 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 8 | 0.39 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 8 | 0.39 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG21 | 9 | 0.39 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG22 | 9 | 0.39 |
| (1,1688) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:181:VAL:HG23 | 9 | 0.39 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 10 | 0.39 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 10 | 0.39 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 10 | 0.39 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG21 | 1:A:182:VAL:H | 18 | 0.39 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG22 | 1:A:182:VAL:H | 18 | 0.39 |
| (1,1682) | 1:A:181:VAL:HG23 | 1:A:182:VAL:H | 18 | 0.39 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 10 | 0.39 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 10 | 0.39 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 10 | 0.39 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:H | 4 | 0.39 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:H | 4 | 0.39 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:H | 4 | 0.39 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG21 | 15 | 0.39 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG22 | 15 | 0.39 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG23 | 15 | 0.39 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:HA | 6 | 0.39 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:HA | 6 | 0.39 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:HA | 6 | 0.39 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HA | 1 | 0.39 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HA | 1 | 0.39 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HA | 1 | 0.39 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:H | 19 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:H | 19 | 0.39 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:H | 19 | 0.39 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 7 | 0.39 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:HA | 3 | 0.39 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:HA | 3 | 0.39 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:HA | 3 | 0.39 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:131:ILE:HG13 | 20 | 0.39 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:131:ILE:HG13 | 20 | 0.39 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:131:ILE:HG13 | 20 | 0.39 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 0.39 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 0.39 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 0.39 |
| (1,841) | 1:A:84:ASN:H | 1:A:84:ASN:HD22 | 8 | 0.38 |
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 15 | 0.38 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 12 | 0.38 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 18 | 0.38 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 20 | 0.38 |
| (1,631) | 1:A:94:GLY:HA3 | 1:A:95:SER:H | 20 | 0.38 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 16 | 0.38 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 1 | 0.38 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 1 | 0.38 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 1 | 0.38 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 12 | 0.38 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 12 | 0.38 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 12 | 0.38 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 12 | 0.38 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 12 | 0.38 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 12 | 0.38 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 20 | 0.38 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 20 | 0.38 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 20 | 0.38 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 20 | 0.38 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 20 | 0.38 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 20 | 0.38 |
| (1,3775) | 1:A:106:ARG:HG3 | 1:A:120:SER:HB2 | 3 | 0.38 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 8 | 0.38 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:33:GLN:HB3 | 1 | 0.38 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:33:GLN:HB3 | 1 | 0.38 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:33:GLN:HB3 | 1 | 0.38 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 1 | 0.38 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 1 | 0.38 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 1 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 5 | 0.38 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 5 | 0.38 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 5 | 0.38 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 5 | 0.38 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 5 | 0.38 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 5 | 0.38 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 6 | 0.38 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 6 | 0.38 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 6 | 0.38 |
| (1,3273) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:159:GLN:HG2 | 4 | 0.38 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 4 | 0.38 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD11 | 17 | 0.38 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD12 | 17 | 0.38 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD13 | 17 | 0.38 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 1 | 0.38 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:183:ASN:HB3 | 13 | 0.38 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:183:ASN:HB3 | 13 | 0.38 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:183:ASN:HB3 | 13 | 0.38 |
| (1,2791) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:46:GLY:HA2 | 14 | 0.38 |
| (1,2780) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA2 | 14 | 0.38 |
| (1,2728) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:14:GLY:HA3 | 8 | 0.38 |
| (1,2540) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:152:ALA:HA | 20 | 0.38 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 9 | 0.38 |
| (1,2435) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:105:ASP:HB2 | 6 | 0.38 |
| (1,2398) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:110:ALA:HB1 | 10 | 0.38 |
| (1,2398) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:110:ALA:HB2 | 10 | 0.38 |
| (1,2398) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:110:ALA:HB3 | 10 | 0.38 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 8 | 0.38 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 8 | 0.38 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 8 | 0.38 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 8 | 0.38 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 8 | 0.38 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 8 | 0.38 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 8 | 0.38 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 8 | 0.38 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 8 | 0.38 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 8 | 0.38 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 8 | 0.38 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 8 | 0.38 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 0.38 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 0.38 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 7 | 0.38 |
| (1,2059) | 1:A:34:LEU:HG | 1:A:52:VAL:HG11 | 9 | 0.38 |
| (1,2059) | 1:A:34:LEU:HG | 1:A:52:VAL:HG12 | 9 | 0.38 |
| (1,2059) | 1:A:34:LEU:HG | 1:A:52:VAL:HG13 | 9 | 0.38 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE21 | 10 | 0.38 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE21 | 10 | 0.38 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE21 | 10 | 0.38 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE22 | 10 | 0.38 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE22 | 10 | 0.38 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE22 | 10 | 0.38 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 1 | 0.38 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 1 | 0.38 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 1 | 0.38 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 7 | 0.38 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 7 | 0.38 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 7 | 0.38 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 20 | 0.38 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 20 | 0.38 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 20 | 0.38 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 4 | 0.38 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 4 | 0.38 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 4 | 0.38 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 4 | 0.38 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 4 | 0.38 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 4 | 0.38 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 10 | 0.38 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 10 | 0.38 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 10 | 0.38 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 10 | 0.38 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 10 | 0.38 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 10 | 0.38 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 15 | 0.38 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 15 | 0.38 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 15 | 0.38 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 15 | 0.38 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 15 | 0.38 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 15 | 0.38 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 12 | 0.38 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 12 | 0.38 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 12 | 0.38 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 13 | 0.38 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 13 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 13 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 3 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 3 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 3 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 3 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 3 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 3 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 3 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 3 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 3 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 15 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 15 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 15 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 15 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 15 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 15 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 15 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 15 | 0.38 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 15 | 0.38 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 13 | 0.38 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 13 | 0.38 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 13 | 0.38 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 4 | 0.38 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 5 | 0.38 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 14 | 0.38 |
| (1,1373) | 1:A:104:LEU:H | 1:A:104:LEU:HD21 | 7 | 0.38 |
| (1,1373) | 1:A:104:LEU:H | 1:A:104:LEU:HD22 | 7 | 0.38 |
| (1,1373) | 1:A:104:LEU:H | 1:A:104:LEU:HD23 | 7 | 0.38 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE21 | 4 | 0.38 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE21 | 4 | 0.38 |
| (1,1100) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE21 | 4 | 0.38 |
| (1,1075) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:H | 10 | 0.38 |
| (1,857) | 1:A:49:SER:H | 1:A:136:ARG:HD3 | 10 | 0.37 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 19 | 0.37 |
| (1,762) | 1:A:90:SER:HB3 | 1:A:91:SER:H | 4 | 0.37 |
| (1,750) | 1:A:133:PHE:HB2 | 1:A:134:GLN:H | 17 | 0.37 |
| (1,686) | 1:A:115:GLY:HA3 | 1:A:117:THR:H | 12 | 0.37 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 12 | 0.37 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 12 | 0.37 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 12 | 0.37 |
| (1,3934) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:138:PHE:HZ | 7 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 0.37 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 0.37 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG13 | 8 | 0.37 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG13 | 8 | 0.37 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG13 | 8 | 0.37 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 11 | 0.37 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 14 | 0.37 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 18 | 0.37 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 18 | 0.37 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 18 | 0.37 |
| (1,3522) | 1:A:120:SER:HB3 | 1:A:121:GLU:H | 12 | 0.37 |
| (1,3486) | 1:A:78:ILE:HG12 | 1:A:79:ASP:HB3 | 13 | 0.37 |
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 16 | 0.37 |
| (1,3219) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:180:GLU:HB2 | 5 | 0.37 |
| (1,3219) | 1:A:36:GLN:HG2 | 1:A:180:GLU:HB2 | 5 | 0.37 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG2 | 2 | 0.37 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG3 | 2 | 0.37 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG2 | 3 | 0.37 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG3 | 3 | 0.37 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:183:ASN:HB3 | 6 | 0.37 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:183:ASN:HB3 | 6 | 0.37 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:183:ASN:HB3 | 6 | 0.37 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:183:ASN:HB3 | 18 | 0.37 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:183:ASN:HB3 | 18 | 0.37 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:183:ASN:HB3 | 18 | 0.37 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 6 | 0.37 |
| (1,2745) | 1:A:104:LEU:HB2 | 1:A:108:GLY:HA3 | 1 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 9 | 0.37 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB1 | 16 | 0.37 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB2 | 16 | 0.37 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB3 | 16 | 0.37 |
| (1,2540) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:152:ALA:HA | 5 | 0.37 |
| (1,2435) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:105:ASP:HB2 | 10 | 0.37 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 15 | 0.37 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 15 | 0.37 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 15 | 0.37 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD21 | 19 | 0.37 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD22 | 19 | 0.37 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD23 | 19 | 0.37 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD21 | 19 | 0.37 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD22 | 19 | 0.37 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD23 | 19 | 0.37 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD21 | 19 | 0.37 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD22 | 19 | 0.37 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD23 | 19 | 0.37 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG21 | 18 | 0.37 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG22 | 18 | 0.37 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG23 | 18 | 0.37 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG21 | 18 | 0.37 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG22 | 18 | 0.37 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG23 | 18 | 0.37 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG21 | 18 | 0.37 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG22 | 18 | 0.37 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG23 | 18 | 0.37 |
| (1,2090) | 1:A:16:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HB | 7 | 0.37 |
| (1,2090) | 1:A:16:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HB | 7 | 0.37 |
| (1,2090) | 1:A:16:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HB | 7 | 0.37 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 17 | 0.37 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 17 | 0.37 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 17 | 0.37 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG21 | 20 | 0.37 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG22 | 20 | 0.37 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG23 | 20 | 0.37 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG21 | 20 | 0.37 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG22 | 20 | 0.37 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG23 | 20 | 0.37 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG21 | 20 | 0.37 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG22 | 20 | 0.37 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG23 | 20 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:H | 6 | 0.37 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:H | 6 | 0.37 |
| (1,1701) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:H | 6 | 0.37 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 19 | 0.37 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 19 | 0.37 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 19 | 0.37 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 19 | 0.37 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 19 | 0.37 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 19 | 0.37 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 19 | 0.37 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 19 | 0.37 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 19 | 0.37 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:48:THR:HA | 10 | 0.37 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:48:THR:HA | 10 | 0.37 |
| (1,1675) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:48:THR:HA | 10 | 0.37 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 13 | 0.37 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 13 | 0.37 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 13 | 0.37 |
| (1,158) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:113:LEU:H | 1 | 0.37 |
| (1,158) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:113:LEU:H | 18 | 0.37 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB1 | 16 | 0.37 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB2 | 16 | 0.37 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB3 | 16 | 0.37 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB1 | 16 | 0.37 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB2 | 16 | 0.37 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB3 | 16 | 0.37 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB1 | 16 | 0.37 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB2 | 16 | 0.37 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB3 | 16 | 0.37 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:HA | 1 | 0.37 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:HA | 1 | 0.37 |
| (1,1477) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:HA | 1 | 0.37 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:H | 8 | 0.37 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:H | 8 | 0.37 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:H | 8 | 0.37 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 8 | 0.37 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 15 | 0.37 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:HA | 14 | 0.37 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:HA | 14 | 0.37 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:HA | 14 | 0.37 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 5 | 0.37 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 5 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 5 | 0.37 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 17 | 0.37 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 17 | 0.37 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 17 | 0.37 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 0.37 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 0.37 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:138:PHE:HB2 | 20 | 0.37 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 2 | 0.36 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 6 | 0.36 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 9 | 0.36 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 9 | 0.36 |
| (1,684) | 1:A:76:THR:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 9 | 0.36 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:54:PHE:H | 16 | 0.36 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:54:PHE:H | 16 | 0.36 |
| (1,676) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:54:PHE:H | 16 | 0.36 |
| (1,573) | 1:A:91:SER:HB2 | 1:A:93:ALA:H | 4 | 0.36 |
| (1,498) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:170:VAL:H | 13 | 0.36 |
| (1,494) | 1:A:14:GLY:HA2 | 1:A:15:GLU:H | 11 | 0.36 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG21 | 3 | 0.36 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG22 | 3 | 0.36 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG23 | 3 | 0.36 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 10 | 0.36 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 10 | 0.36 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 10 | 0.36 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 11 | 0.36 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 11 | 0.36 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 11 | 0.36 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE1 | 14 | 0.36 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE2 | 14 | 0.36 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.36 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.36 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.36 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.36 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.36 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.36 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.36 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.36 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.36 |
| (1,3671) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:32:VAL:HA | 10 | 0.36 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 18 | 0.36 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 10 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 13 | 0.36 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 4 | 0.36 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 4 | 0.36 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 4 | 0.36 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 11 | 0.36 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 11 | 0.36 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 11 | 0.36 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 14 | 0.36 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 14 | 0.36 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 14 | 0.36 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 20 | 0.36 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 20 | 0.36 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 20 | 0.36 |
| (1,3564) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HA | 13 | 0.36 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD2 | 1 | 0.36 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD3 | 1 | 0.36 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 9 | 0.36 |
| (1,3273) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:159:GLN:HG2 | 9 | 0.36 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB3 | 3 | 0.36 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB3 | 3 | 0.36 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB3 | 3 | 0.36 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 4 | 0.36 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 16 | 0.36 |
| (1,2941) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:13:LYS:HA | 3 | 0.36 |
| (1,2857) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:111:LEU:HG | 14 | 0.36 |
| (1,2857) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:111:LEU:HG | 19 | 0.36 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 10 | 0.36 |
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 5 | 0.36 |
| (1,2576) | 1:A:59:ASN:HA | 1:A:129:ASN:HD21 | 3 | 0.36 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG11 | 7 | 0.36 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG12 | 7 | 0.36 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG13 | 7 | 0.36 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG21 | 14 | 0.36 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG22 | 14 | 0.36 |
| (1,2480) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:52:VAL:HG23 | 14 | 0.36 |
| (1,2435) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:105:ASP:HB2 | 12 | 0.36 |
| (1,2398) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:110:ALA:HB1 | 14 | 0.36 |
| (1,2398) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:110:ALA:HB2 | 14 | 0.36 |
| (1,2398) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:110:ALA:HB3 | 14 | 0.36 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB1 | 1:A:149:ASN:HD21 | 3 | 0.36 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB2 | 1:A:149:ASN:HD21 | 3 | 0.36 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB3 | 1:A:149:ASN:HD21 | 3 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB1 | 7 | 0.36 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB2 | 7 | 0.36 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB3 | 7 | 0.36 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB1 | 7 | 0.36 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB2 | 7 | 0.36 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB3 | 7 | 0.36 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB1 | 7 | 0.36 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB2 | 7 | 0.36 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB3 | 7 | 0.36 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:102:GLN:H | 8 | 0.36 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:102:GLN:H | 8 | 0.36 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:102:GLN:H | 8 | 0.36 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:102:GLN:H | 9 | 0.36 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:102:GLN:H | 9 | 0.36 |
| (1,2215) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:102:GLN:H | 9 | 0.36 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 0.36 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 0.36 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 0.36 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG11 | 14 | 0.36 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG12 | 14 | 0.36 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG13 | 14 | 0.36 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 9 | 0.36 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 9 | 0.36 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 9 | 0.36 |
| (1,1975) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:129:ASN:HB2 | 9 | 0.36 |
| (1,1975) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:129:ASN:HB2 | 9 | 0.36 |
| (1,1975) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:129:ASN:HB2 | 9 | 0.36 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 8 | 0.36 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 8 | 0.36 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 8 | 0.36 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 13 | 0.36 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 13 | 0.36 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 13 | 0.36 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 17 | 0.36 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 17 | 0.36 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 17 | 0.36 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 9 | 0.36 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 9 | 0.36 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 9 | 0.36 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 15 | 0.36 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 15 | 0.36 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 15 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 9 | 0.36 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 9 | 0.36 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 9 | 0.36 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 4 | 0.36 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 4 | 0.36 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 4 | 0.36 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 5 | 0.36 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 5 | 0.36 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 5 | 0.36 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 7 | 0.36 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 7 | 0.36 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 7 | 0.36 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 7 | 0.36 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 7 | 0.36 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 7 | 0.36 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 7 | 0.36 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 7 | 0.36 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 7 | 0.36 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 5 | 0.36 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 5 | 0.36 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 5 | 0.36 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:H | 1 | 0.36 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:H | 1 | 0.36 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:H | 1 | 0.36 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG21 | 9 | 0.36 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG22 | 9 | 0.36 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG23 | 9 | 0.36 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 7 | 0.36 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 7 | 0.36 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 7 | 0.36 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 9 | 0.36 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 9 | 0.36 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 9 | 0.36 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 15 | 0.36 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 15 | 0.36 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 15 | 0.36 |
| (1,1467) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:LYS:HG2 | 13 | 0.36 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 6 | 0.36 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 5 | 0.36 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 5 | 0.36 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 5 | 0.36 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 5 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 5 | 0.36 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 5 | 0.36 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 13 | 0.36 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 13 | 0.36 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 13 | 0.36 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:178:LYS:H | 5 | 0.36 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:178:LYS:H | 5 | 0.36 |
| (1,1268) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:178:LYS:H | 5 | 0.36 |
| (1,1106) | 1:A:74:LEU:HB3 | 1:A:115:GLY:H | 14 | 0.36 |
| (1,1075) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:H | 18 | 0.36 |
| (1,573) | 1:A:91:SER:HB2 | 1:A:93:ALA:H | 5 | 0.35 |
| (1,573) | 1:A:91:SER:HB2 | 1:A:93:ALA:H | 8 | 0.35 |
| (1,534) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:156:VAL:H | 10 | 0.35 |
| (1,3776) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HG21 | 9 | 0.35 |
| (1,3776) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HG22 | 9 | 0.35 |
| (1,3776) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HG23 | 9 | 0.35 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 1 | 0.35 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 11 | 0.35 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 13 | 0.35 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 13 | 0.35 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 13 | 0.35 |
| (1,3273) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:159:GLN:HG2 | 20 | 0.35 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 18 | 0.35 |
| (1,3219) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:180:GLU:HB2 | 18 | 0.35 |
| (1,3219) | 1:A:36:GLN:HG2 | 1:A:180:GLU:HB2 | 18 | 0.35 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB3 | 10 | 0.35 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB3 | 10 | 0.35 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB3 | 10 | 0.35 |
| (1,3162) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HB3 | 5 | 0.35 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:183:ASN:HB3 | 19 | 0.35 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:183:ASN:HB3 | 19 | 0.35 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:183:ASN:HB3 | 19 | 0.35 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 2 | 0.35 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 9 | 0.35 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 12 | 0.35 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 15 | 0.35 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 18 | 0.35 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 20 | 0.35 |
| (1,2857) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:111:LEU:HG | 9 | 0.35 |
| (1,2857) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:111:LEU:HG | 20 | 0.35 |
| (1,2419) | 1:A:129:ASN:HA | 1:A:129:ASN:HD22 | 4 | 0.35 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG21 | 9 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG22 | 9 | 0.35 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG23 | 9 | 0.35 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG21 | 9 | 0.35 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG22 | 9 | 0.35 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG23 | 9 | 0.35 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG21 | 9 | 0.35 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG22 | 9 | 0.35 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG23 | 9 | 0.35 |
| (1,2352) | 1:A:96:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 0.35 |
| (1,2352) | 1:A:96:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 0.35 |
| (1,2352) | 1:A:96:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 0.35 |
| (1,2317) | 1:A:44:GLN:HA | 1:A:141:GLY:HA3 | 5 | 0.35 |
| (1,2317) | 1:A:44:GLN:HA | 1:A:141:GLY:HA3 | 20 | 0.35 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 2 | 0.35 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 2 | 0.35 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 2 | 0.35 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG11 | 4 | 0.35 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG12 | 4 | 0.35 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG13 | 4 | 0.35 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG21 | 19 | 0.35 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG22 | 19 | 0.35 |
| (1,1837) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:28:VAL:HG23 | 19 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG21 | 12 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG22 | 12 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG23 | 12 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG21 | 12 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG22 | 12 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG23 | 12 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG21 | 12 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG22 | 12 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG23 | 12 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG21 | 16 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG22 | 16 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG23 | 16 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG21 | 16 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG22 | 16 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG23 | 16 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG21 | 16 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG22 | 16 | 0.35 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG23 | 16 | 0.35 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 16 | 0.35 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 16 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 16 | 0.35 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:138:PHE:H | 17 | 0.35 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:H | 17 | 0.35 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:138:PHE:H | 17 | 0.35 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:H | 20 | 0.35 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:H | 20 | 0.35 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:H | 20 | 0.35 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:H | 5 | 0.35 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:H | 5 | 0.35 |
| (1,1560) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:H | 5 | 0.35 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 0.35 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 0.35 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 0.35 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 15 | 0.35 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 15 | 0.35 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 15 | 0.35 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 15 | 0.35 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 15 | 0.35 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 15 | 0.35 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 15 | 0.35 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 15 | 0.35 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 15 | 0.35 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 19 | 0.35 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 19 | 0.35 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 19 | 0.35 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 19 | 0.35 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 19 | 0.35 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 19 | 0.35 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 19 | 0.35 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 19 | 0.35 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 19 | 0.35 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 16 | 0.35 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 16 | 0.35 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 16 | 0.35 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 16 | 0.35 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 16 | 0.35 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 16 | 0.35 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 16 | 0.35 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 16 | 0.35 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 16 | 0.35 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HA | 12 | 0.35 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HA | 12 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HA | 12 | 0.35 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HA | 15 | 0.35 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HA | 15 | 0.35 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HA | 15 | 0.35 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HD21 | 18 | 0.34 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HD21 | 18 | 0.34 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HD21 | 18 | 0.34 |
| (1,942) | 1:A:24:ASP:HB2 | 1:A:27:SER:H | 14 | 0.34 |
| (1,927) | 1:A:79:ASP:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 11 | 0.34 |
| (1,927) | 1:A:79:ASP:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 11 | 0.34 |
| (1,927) | 1:A:79:ASP:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 11 | 0.34 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 9 | 0.34 |
| (1,857) | 1:A:49:SER:H | 1:A:136:ARG:HD3 | 8 | 0.34 |
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 9 | 0.34 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 5 | 0.34 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 16 | 0.34 |
| (1,750) | 1:A:133:PHE:HB2 | 1:A:134:GLN:H | 3 | 0.34 |
| (1,750) | 1:A:133:PHE:HB2 | 1:A:134:GLN:H | 10 | 0.34 |
| (1,750) | 1:A:133:PHE:HB2 | 1:A:134:GLN:H | 15 | 0.34 |
| (1,573) | 1:A:91:SER:HB2 | 1:A:93:ALA:H | 2 | 0.34 |
| (1,573) | 1:A:91:SER:HB2 | 1:A:93:ALA:H | 3 | 0.34 |
| (1,573) | 1:A:91:SER:HB2 | 1:A:93:ALA:H | 9 | 0.34 |
| (1,573) | 1:A:91:SER:HB2 | 1:A:93:ALA:H | 19 | 0.34 |
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 5 | 0.34 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 2 | 0.34 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 2 | 0.34 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 2 | 0.34 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 2 | 0.34 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 2 | 0.34 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 2 | 0.34 |
| (1,365) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:138:PHE:H | 12 | 0.34 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 3 | 0.34 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 7 | 0.34 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 2 | 0.34 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 2 | 0.34 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 2 | 0.34 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 16 | 0.34 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 16 | 0.34 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 16 | 0.34 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD2 | 16 | 0.34 |
| (1,3506) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:13:LYS:HD3 | 16 | 0.34 |
| (1,3486) | 1:A:78:ILE:HG12 | 1:A:79:ASP:HB3 | 20 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,303) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 15 | 0.34 |
| (1,303) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 15 | 0.34 |
| (1,303) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 15 | 0.34 |
| (1,2987) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:66:ALA:H | 5 | 0.34 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 8 | 0.34 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 10 | 0.34 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 13 | 0.34 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 17 | 0.34 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 19 | 0.34 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG11 | 8 | 0.34 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG12 | 8 | 0.34 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG13 | 8 | 0.34 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG11 | 8 | 0.34 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG12 | 8 | 0.34 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG13 | 8 | 0.34 |
| (1,2857) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:111:LEU:HG | 15 | 0.34 |
| (1,2791) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:46:GLY:HA2 | 12 | 0.34 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB3 | 20 | 0.34 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB3 | 20 | 0.34 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB3 | 20 | 0.34 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 7 | 0.34 |
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 13 | 0.34 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG21 | 3 | 0.34 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG22 | 3 | 0.34 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG23 | 3 | 0.34 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 18 | 0.34 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 18 | 0.34 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 18 | 0.34 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB1 | 2 | 0.34 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB2 | 2 | 0.34 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB3 | 2 | 0.34 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB1 | 2 | 0.34 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB2 | 2 | 0.34 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB3 | 2 | 0.34 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB1 | 2 | 0.34 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB2 | 2 | 0.34 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB3 | 2 | 0.34 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB1 | 18 | 0.34 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB2 | 18 | 0.34 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB3 | 18 | 0.34 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB1 | 18 | 0.34 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB2 | 18 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB3 | 18 | 0.34 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB1 | 18 | 0.34 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB2 | 18 | 0.34 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB3 | 18 | 0.34 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG21 | 3 | 0.34 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG22 | 3 | 0.34 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG23 | 3 | 0.34 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG21 | 3 | 0.34 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG22 | 3 | 0.34 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG23 | 3 | 0.34 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG21 | 3 | 0.34 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG22 | 3 | 0.34 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG23 | 3 | 0.34 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:H | 3 | 0.34 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:H | 3 | 0.34 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:H | 3 | 0.34 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG11 | 6 | 0.34 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG12 | 6 | 0.34 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG13 | 6 | 0.34 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG11 | 13 | 0.34 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG12 | 13 | 0.34 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG13 | 13 | 0.34 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 11 | 0.34 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 11 | 0.34 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 11 | 0.34 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 13 | 0.34 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 13 | 0.34 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 13 | 0.34 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 19 | 0.34 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 19 | 0.34 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 19 | 0.34 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG21 | 4 | 0.34 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG22 | 4 | 0.34 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG23 | 4 | 0.34 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG21 | 19 | 0.34 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG22 | 19 | 0.34 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG23 | 19 | 0.34 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG21 | 19 | 0.34 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG22 | 19 | 0.34 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG23 | 19 | 0.34 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG21 | 19 | 0.34 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG22 | 19 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG23 | 19 | 0.34 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 5 | 0.34 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 5 | 0.34 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 5 | 0.34 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 5 | 0.34 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 5 | 0.34 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 5 | 0.34 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 7 | 0.34 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 7 | 0.34 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 7 | 0.34 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 7 | 0.34 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 7 | 0.34 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 7 | 0.34 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 9 | 0.34 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 9 | 0.34 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 9 | 0.34 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 6 | 0.34 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 6 | 0.34 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 6 | 0.34 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 6 | 0.34 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 6 | 0.34 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 6 | 0.34 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 6 | 0.34 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 6 | 0.34 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 6 | 0.34 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 3 | 0.34 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 3 | 0.34 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 3 | 0.34 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB1 | 10 | 0.34 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB2 | 10 | 0.34 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:110:ALA:HB3 | 10 | 0.34 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB1 | 10 | 0.34 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB2 | 10 | 0.34 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:110:ALA:HB3 | 10 | 0.34 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB1 | 10 | 0.34 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB2 | 10 | 0.34 |
| (1,1569) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:110:ALA:HB3 | 10 | 0.34 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 0.34 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 0.34 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 0.34 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 0.34 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 0.34 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:H | 4 | 0.34 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:H | 4 | 0.34 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:H | 4 | 0.34 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:H | 18 | 0.34 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:H | 18 | 0.34 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:H | 18 | 0.34 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 12 | 0.34 |
| (1,1393) | 1:A:48:THR:HA | 1:A:138:PHE:HB3 | 10 | 0.34 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 10 | 0.34 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 10 | 0.34 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 10 | 0.34 |
| (1,1080) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:GLY:HA3 | 18 | 0.34 |
| (1,1019) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:138:PHE:HB2 | 10 | 0.34 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 8 | 0.33 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 4 | 0.33 |
| (1,764) | 1:A:91:SER:H | 1:A:91:SER:HB3 | 16 | 0.33 |
| (1,645) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:31:THR:H | 17 | 0.33 |
| (1,596) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:30:GLN:HG3 | 9 | 0.33 |
| (1,596) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:30:GLN:HG3 | 18 | 0.33 |
| (1,573) | 1:A:91:SER:HB2 | 1:A:93:ALA:H | 6 | 0.33 |
| (1,560) | 1:A:151:ASP:H | 1:A:151:ASP:HB2 | 2 | 0.33 |
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 3 | 0.33 |
| (1,498) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:170:VAL:H | 16 | 0.33 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG21 | 10 | 0.33 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG22 | 10 | 0.33 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG23 | 10 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 2 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 2 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 2 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 2 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 2 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 2 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 8 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 8 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 8 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 8 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 8 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 8 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 15 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 15 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 15 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 15 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 15 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 15 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 16 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 16 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 16 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 16 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 16 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 16 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 17 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 17 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 17 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 17 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 17 | 0.33 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 17 | 0.33 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 0.33 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 0.33 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 0.33 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 0.33 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 0.33 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 0.33 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 0.33 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 0.33 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 0.33 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 15 | 0.33 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 16 | 0.33 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 17 | 0.33 |
| (1,3513) | 1:A:106:ARG:HG3 | 1:A:120:SER:HB3 | 4 | 0.33 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB1 | 3 | 0.33 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB2 | 3 | 0.33 |
| (1,3392) | 1:A:91:SER:HB3 | 1:A:147:ALA:HB3 | 3 | 0.33 |
| (1,3273) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:159:GLN:HG2 | 19 | 0.33 |
| (1,3238) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:176:HIS:H | 17 | 0.33 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD11 | 10 | 0.33 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD12 | 10 | 0.33 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD13 | 10 | 0.33 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB2 | 18 | 0.33 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB2 | 18 | 0.33 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB2 | 18 | 0.33 |
| (1,2767) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA3 | 20 | 0.33 |
| (1,2761) | 1:A:24:ASP:HB3 | 1:A:59:ASN:HD21 | 4 | 0.33 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 6 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 1 | 0.33 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD11 | 14 | 0.33 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD12 | 14 | 0.33 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD13 | 14 | 0.33 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 18 | 0.33 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG21 | 10 | 0.33 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG22 | 10 | 0.33 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG23 | 10 | 0.33 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG21 | 12 | 0.33 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG22 | 12 | 0.33 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG23 | 12 | 0.33 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 11 | 0.33 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 11 | 0.33 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 11 | 0.33 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 13 | 0.33 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 13 | 0.33 |
| (1,2307) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 13 | 0.33 |
| (1,229) | 1:A:165:GLY:HA2 | 1:A:166:ALA:H | 12 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB1 | 15 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB2 | 15 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB3 | 15 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB1 | 15 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB2 | 15 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB3 | 15 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB1 | 15 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB2 | 15 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB3 | 15 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB1 | 17 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB2 | 17 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB3 | 17 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB1 | 17 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB2 | 17 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB3 | 17 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB1 | 17 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB2 | 17 | 0.33 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB3 | 17 | 0.33 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG11 | 7 | 0.33 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG12 | 7 | 0.33 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG13 | 7 | 0.33 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG11 | 18 | 0.33 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG12 | 18 | 0.33 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG13 | 18 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 10 | 0.33 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 10 | 0.33 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 10 | 0.33 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:H | 11 | 0.33 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:H | 11 | 0.33 |
| (1,2056) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:H | 11 | 0.33 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE21 | 1 | 0.33 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE21 | 1 | 0.33 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE21 | 1 | 0.33 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE22 | 1 | 0.33 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE22 | 1 | 0.33 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE22 | 1 | 0.33 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 19 | 0.33 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 19 | 0.33 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 19 | 0.33 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:173:GLY:HA2 | 1 | 0.33 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:173:GLY:HA2 | 1 | 0.33 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:173:GLY:HA2 | 1 | 0.33 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 8 | 0.33 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 8 | 0.33 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 8 | 0.33 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 8 | 0.33 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 8 | 0.33 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 8 | 0.33 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 20 | 0.33 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 20 | 0.33 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 20 | 0.33 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 20 | 0.33 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 20 | 0.33 |
| (1,1766) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 20 | 0.33 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:59:ASN:H | 3 | 0.33 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:59:ASN:H | 3 | 0.33 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:59:ASN:H | 3 | 0.33 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:138:PHE:H | 2 | 0.33 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:H | 2 | 0.33 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:138:PHE:H | 2 | 0.33 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:24:ASP:H | 2 | 0.33 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:24:ASP:H | 2 | 0.33 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:24:ASP:H | 2 | 0.33 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 11 | 0.33 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 11 | 0.33 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 11 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 11 | 0.33 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 11 | 0.33 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 11 | 0.33 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 11 | 0.33 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 11 | 0.33 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 11 | 0.33 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG21 | 5 | 0.33 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG22 | 5 | 0.33 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG23 | 5 | 0.33 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 2 | 0.33 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 2 | 0.33 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 2 | 0.33 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 0.33 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 0.33 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 0.33 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 0.33 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 0.33 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 0.33 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 0.33 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 0.33 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 0.33 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.33 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.33 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.33 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.33 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.33 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.33 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.33 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.33 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.33 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 3 | 0.33 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 3 | 0.33 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 3 | 0.33 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 7 | 0.33 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 7 | 0.33 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 7 | 0.33 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 11 | 0.33 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 16 | 0.33 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 18 | 0.33 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 20 | 0.33 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 0.33 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 0.33 |
| (1,1145) | 1:A:159:GLN:HB2 | 1:A:160:GLY:H | 18 | 0.33 |
| (1,1075) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:H | 13 | 0.33 |
| (1,1075) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:H | 17 | 0.33 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HD21 | 10 | 0.32 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HD21 | 10 | 0.32 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HD21 | 10 | 0.32 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 16 | 0.32 |
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 2 | 0.32 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 11 | 0.32 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 12 | 0.32 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 12 | 0.32 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 12 | 0.32 |
| (1,596) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:30:GLN:HG3 | 6 | 0.32 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG21 | 2 | 0.32 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG22 | 2 | 0.32 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG23 | 2 | 0.32 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 7 | 0.32 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 7 | 0.32 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 7 | 0.32 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 7 | 0.32 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 7 | 0.32 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 7 | 0.32 |
| (1,3745) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HA | 17 | 0.32 |
| (1,374) | 1:A:12:PHE:H | 1:A:12:PHE:HB3 | 13 | 0.32 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 0.32 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 0.32 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 0.32 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 0.32 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 0.32 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 0.32 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 0.32 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 0.32 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 0.32 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG13 | 11 | 0.32 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG13 | 11 | 0.32 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG13 | 11 | 0.32 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG13 | 15 | 0.32 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG13 | 15 | 0.32 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG13 | 15 | 0.32 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 2 | 0.32 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 6 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 16 | 0.32 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 5 | 0.32 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 15 | 0.32 |
| (1,3564) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HA | 2 | 0.32 |
| (1,3515) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:120:SER:HB3 | 3 | 0.32 |
| (1,3445) | 1:A:90:SER:H | 1:A:90:SER:HB2 | 3 | 0.32 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 18 | 0.32 |
| (1,3132) | 1:A:157:GLN:HG2 | 1:A:159:GLN:HG3 | 3 | 0.32 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:183:ASN:HB3 | 5 | 0.32 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:183:ASN:HB3 | 5 | 0.32 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:183:ASN:HB3 | 5 | 0.32 |
| (1,2761) | 1:A:24:ASP:HB3 | 1:A:59:ASN:HD21 | 6 | 0.32 |
| (1,2729) | 1:A:14:GLY:HA2 | 1:A:15:GLU:HB3 | 14 | 0.32 |
| (1,2726) | 1:A:8:GLY:HA2 | 1:A:9:THR:H | 8 | 0.32 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:HA3 | 16 | 0.32 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:HA3 | 16 | 0.32 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:HA3 | 16 | 0.32 |
| (1,2540) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:152:ALA:HA | 11 | 0.32 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG11 | 5 | 0.32 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG12 | 5 | 0.32 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG13 | 5 | 0.32 |
| (1,2460) | 1:A:105:ASP:HA | 1:A:133:PHE:HB2 | 4 | 0.32 |
| (1,2435) | 1:A:104:LEU:HA | 1:A:105:ASP:HB2 | 19 | 0.32 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG21 | 6 | 0.32 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG22 | 6 | 0.32 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG23 | 6 | 0.32 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG21 | 9 | 0.32 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG22 | 9 | 0.32 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG23 | 9 | 0.32 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG21 | 11 | 0.32 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG22 | 11 | 0.32 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG23 | 11 | 0.32 |
| (1,229) | 1:A:165:GLY:HA2 | 1:A:166:ALA:H | 1 | 0.32 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB1 | 1 | 0.32 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB2 | 1 | 0.32 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB3 | 1 | 0.32 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB1 | 1 | 0.32 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB2 | 1 | 0.32 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB3 | 1 | 0.32 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB1 | 1 | 0.32 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB2 | 1 | 0.32 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB3 | 1 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB1 | 9 | 0.32 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB3 | 9 | 0.32 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB1 | 9 | 0.32 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB3 | 9 | 0.32 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB1 | 9 | 0.32 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB3 | 9 | 0.32 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 0.32 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 0.32 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 0.32 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 0.32 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 0.32 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 0.32 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 3 | 0.32 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 3 | 0.32 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 3 | 0.32 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE21 | 12 | 0.32 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE21 | 12 | 0.32 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE21 | 12 | 0.32 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE22 | 12 | 0.32 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE22 | 12 | 0.32 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE22 | 12 | 0.32 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 7 | 0.32 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 7 | 0.32 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 7 | 0.32 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 5 | 0.32 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 5 | 0.32 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 5 | 0.32 |
| (1,1826) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:90:SER:HB2 | 19 | 0.32 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG21 | 6 | 0.32 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG22 | 6 | 0.32 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG23 | 6 | 0.32 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 10 | 0.32 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 10 | 0.32 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 10 | 0.32 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 17 | 0.32 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 17 | 0.32 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 17 | 0.32 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 17 | 0.32 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 17 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 17 | 0.32 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 17 | 0.32 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 17 | 0.32 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 17 | 0.32 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 0.32 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 0.32 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 0.32 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 0.32 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 0.32 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 0.32 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 0.32 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 0.32 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 0.32 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 13 | 0.32 |
| (1,1373) | 1:A:104:LEU:H | 1:A:104:LEU:HD21 | 13 | 0.32 |
| (1,1373) | 1:A:104:LEU:H | 1:A:104:LEU:HD22 | 13 | 0.32 |
| (1,1373) | 1:A:104:LEU:H | 1:A:104:LEU:HD23 | 13 | 0.32 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 7 | 0.32 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 7 | 0.32 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 7 | 0.32 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 7 | 0.32 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 7 | 0.32 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 7 | 0.32 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 7 | 0.32 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 7 | 0.32 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 7 | 0.32 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 0.32 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 0.32 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 0.32 |
| (1,1080) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:GLY:HA3 | 2 | 0.32 |
| (1,1080) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:GLY:HA3 | 8 | 0.32 |
| (1,1075) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:H | 5 | 0.32 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:153:THR:H | 19 | 0.32 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:153:THR:H | 19 | 0.32 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:153:THR:H | 19 | 0.32 |
| (1,1019) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:138:PHE:HB2 | 5 | 0.32 |
| (1,985) | 1:A:61:CYS:HB3 | 1:A:127:GLY:H | 2 | 0.31 |
| (1,942) | 1:A:24:ASP:HB2 | 1:A:27:SER:H | 13 | 0.31 |
| (1,737) | 1:A:106:ARG:H | 1:A:106:ARG:HB2 | 3 | 0.31 |
| (1,573) | 1:A:91:SER:HB2 | 1:A:93:ALA:H | 7 | 0.31 |
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 13 | 0.31 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 4 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 14 | 0.31 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 14 | 0.31 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 14 | 0.31 |
| (1,420) | 1:A:73:PHE:H | 1:A:111:LEU:HD11 | 19 | 0.31 |
| (1,420) | 1:A:73:PHE:H | 1:A:111:LEU:HD12 | 19 | 0.31 |
| (1,420) | 1:A:73:PHE:H | 1:A:111:LEU:HD13 | 19 | 0.31 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG21 | 5 | 0.31 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG22 | 5 | 0.31 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG23 | 5 | 0.31 |
| (1,3934) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:138:PHE:HZ | 10 | 0.31 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 3 | 0.31 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 3 | 0.31 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 3 | 0.31 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 3 | 0.31 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 3 | 0.31 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 3 | 0.31 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 19 | 0.31 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 19 | 0.31 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 19 | 0.31 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 19 | 0.31 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 19 | 0.31 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 19 | 0.31 |
| (1,3778) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HB | 5 | 0.31 |
| (1,3745) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:175:VAL:HA | 3 | 0.31 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 5 | 0.31 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 19 | 0.31 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 12 | 0.31 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 12 | 0.31 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 12 | 0.31 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 12 | 0.31 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 12 | 0.31 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 12 | 0.31 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 8 | 0.31 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 8 | 0.31 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 8 | 0.31 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD21 | 19 | 0.31 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD22 | 19 | 0.31 |
| (1,3596) | 1:A:39:THR:HA | 1:A:42:LEU:HD23 | 19 | 0.31 |
| (1,3551) | 1:A:37:VAL:HA | 1:A:38:ARG:HG2 | 20 | 0.31 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 5 | 0.31 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 15 | 0.31 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB2 | 15 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB2 | 15 | 0.31 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB2 | 15 | 0.31 |
| (1,3197) | 1:A:99:VAL:HB | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 0.31 |
| (1,3197) | 1:A:99:VAL:HB | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 0.31 |
| (1,3197) | 1:A:99:VAL:HB | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 0.31 |
| (1,3197) | 1:A:99:VAL:HB | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 0.31 |
| (1,3197) | 1:A:99:VAL:HB | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 0.31 |
| (1,3197) | 1:A:99:VAL:HB | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 0.31 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB3 | 8 | 0.31 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB3 | 8 | 0.31 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB3 | 8 | 0.31 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB3 | 16 | 0.31 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB3 | 16 | 0.31 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB3 | 16 | 0.31 |
| (1,2922) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:125:ASN:HB2 | 18 | 0.31 |
| (1,2677) | 1:A:28:VAL:HB | 1:A:173:GLY:HA2 | 5 | 0.31 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB1 | 1:A:149:ASN:HD21 | 10 | 0.31 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB2 | 1:A:149:ASN:HD21 | 10 | 0.31 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB3 | 1:A:149:ASN:HD21 | 10 | 0.31 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD21 | 16 | 0.31 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD22 | 16 | 0.31 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD23 | 16 | 0.31 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD21 | 16 | 0.31 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD22 | 16 | 0.31 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD23 | 16 | 0.31 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD21 | 16 | 0.31 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD22 | 16 | 0.31 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD23 | 16 | 0.31 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 0.31 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 0.31 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 0.31 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG11 | 5 | 0.31 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG12 | 5 | 0.31 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG13 | 5 | 0.31 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 19 | 0.31 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 19 | 0.31 |
| (1,1854) | 1:A:65:VAL:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 19 | 0.31 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG21 | 18 | 0.31 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG22 | 18 | 0.31 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG23 | 18 | 0.31 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:138:PHE:H | 6 | 0.31 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:H | 6 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:138:PHE:H | 6 | 0.31 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB3 | 18 | 0.31 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB3 | 18 | 0.31 |
| (1,1705) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB3 | 18 | 0.31 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 1 | 0.31 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 1 | 0.31 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 1 | 0.31 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 20 | 0.31 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 20 | 0.31 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 20 | 0.31 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 0.31 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 0.31 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 0.31 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 0.31 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 0.31 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 0.31 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 0.31 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 0.31 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 0.31 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.31 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.31 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.31 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HA | 11 | 0.31 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HA | 11 | 0.31 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HA | 11 | 0.31 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:H | 1 | 0.31 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:H | 1 | 0.31 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:H | 1 | 0.31 |
| (1,142) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HB3 | 19 | 0.31 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD3 | 20 | 0.31 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD3 | 20 | 0.31 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD3 | 20 | 0.31 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD2 | 20 | 0.31 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD2 | 20 | 0.31 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD2 | 20 | 0.31 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE22 | 9 | 0.31 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE22 | 9 | 0.31 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE22 | 9 | 0.31 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 0.31 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 0.31 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 0.31 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 0.31 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 0.31 |
| (1,1106) | 1:A:74:LEU:HB3 | 1:A:115:GLY:H | 11 | 0.31 |
| (1,1102) | 1:A:108:GLY:HA2 | 1:A:134:GLN:HE22 | 3 | 0.31 |
| (1,927) | 1:A:79:ASP:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 7 | 0.3 |
| (1,927) | 1:A:79:ASP:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 7 | 0.3 |
| (1,927) | 1:A:79:ASP:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 7 | 0.3 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 7 | 0.3 |
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 14 | 0.3 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 10 | 0.3 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 4 | 0.3 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 4 | 0.3 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 4 | 0.3 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 11 | 0.3 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 11 | 0.3 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 11 | 0.3 |
| (1,596) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:30:GLN:HG3 | 4 | 0.3 |
| (1,560) | 1:A:151:ASP:H | 1:A:151:ASP:HB2 | 20 | 0.3 |
| (1,56) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:131:ILE:H | 9 | 0.3 |
| (1,498) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:170:VAL:H | 14 | 0.3 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 10 | 0.3 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 10 | 0.3 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 10 | 0.3 |
| (1,454) | 1:A:170:VAL:HG21 | 1:A:171:ASN:H | 12 | 0.3 |
| (1,454) | 1:A:170:VAL:HG22 | 1:A:171:ASN:H | 12 | 0.3 |
| (1,454) | 1:A:170:VAL:HG23 | 1:A:171:ASN:H | 12 | 0.3 |
| (1,3888) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 6 | 0.3 |
| (1,3888) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 6 | 0.3 |
| (1,3888) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 6 | 0.3 |
| (1,3888) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 6 | 0.3 |
| (1,3888) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 6 | 0.3 |
| (1,3888) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 6 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 1 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 1 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 1 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 1 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 1 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 1 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 6 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 6 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 6 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 6 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 6 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 6 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 7 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 7 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 7 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 7 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 7 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 7 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 10 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 10 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 10 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 10 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 10 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 10 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 13 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 13 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 13 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 13 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 13 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 13 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 18 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 18 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 18 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 18 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 18 | 0.3 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 18 | 0.3 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 15 | 0.3 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 15 | 0.3 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 15 | 0.3 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 15 | 0.3 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 15 | 0.3 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 15 | 0.3 |
| (1,3778) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HB | 15 | 0.3 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 0.3 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 0.3 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 0.3 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 0.3 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 0.3 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 0.3 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 0.3 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 0.3 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG11 | 2 | 0.3 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG12 | 2 | 0.3 |
| (1,3635) | 1:A:33:GLN:HB3 | 1:A:52:VAL:HG13 | 2 | 0.3 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 9 | 0.3 |
| (1,3527) | 1:A:176:HIS:HB2 | 1:A:178:LYS:HE2 | 11 | 0.3 |
| (1,3486) | 1:A:78:ILE:HG12 | 1:A:79:ASP:HB3 | 5 | 0.3 |
| (1,3469) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:112:THR:HA | 15 | 0.3 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 11 | 0.3 |
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 4 | 0.3 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG2 | 7 | 0.3 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG3 | 7 | 0.3 |
| (1,2987) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:66:ALA:H | 3 | 0.3 |
| (1,2987) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:66:ALA:H | 8 | 0.3 |
| (1,2987) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:66:ALA:H | 15 | 0.3 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:183:ASN:HB3 | 20 | 0.3 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:183:ASN:HB3 | 20 | 0.3 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:183:ASN:HB3 | 20 | 0.3 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HB2 | 16 | 0.3 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HB2 | 16 | 0.3 |
| (1,2982) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HB2 | 16 | 0.3 |
| (1,2923) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:62:ASP:H | 10 | 0.3 |
| (1,2872) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:178:LYS:HE2 | 8 | 0.3 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB3 | 12 | 0.3 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB3 | 12 | 0.3 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB3 | 12 | 0.3 |
| (1,2761) | 1:A:24:ASP:HB3 | 1:A:59:ASN:HD21 | 3 | 0.3 |
| (1,2761) | 1:A:24:ASP:HB3 | 1:A:59:ASN:HD21 | 7 | 0.3 |
| (1,2761) | 1:A:24:ASP:HB3 | 1:A:59:ASN:HD21 | 10 | 0.3 |
| (1,2761) | 1:A:24:ASP:HB3 | 1:A:59:ASN:HD21 | 14 | 0.3 |
| (1,2745) | 1:A:104:LEU:HB2 | 1:A:108:GLY:HA3 | 5 | 0.3 |
| (1,2728) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:14:GLY:HA3 | 5 | 0.3 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB1 | 20 | 0.3 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB2 | 20 | 0.3 |
| (1,2695) | 1:A:164:GLY:HA3 | 1:A:166:ALA:HB3 | 20 | 0.3 |
| (1,2540) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:152:ALA:HA | 6 | 0.3 |
| (1,2414) | 1:A:36:GLN:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 5 | 0.3 |
| (1,2414) | 1:A:36:GLN:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 5 | 0.3 |
| (1,2414) | 1:A:36:GLN:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 5 | 0.3 |
| (1,2352) | 1:A:96:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 0.3 |
| (1,2352) | 1:A:96:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 0.3 |
| (1,2352) | 1:A:96:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 0.3 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 3 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 3 | 0.3 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 3 | 0.3 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB1 | 12 | 0.3 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB2 | 12 | 0.3 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB3 | 12 | 0.3 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB1 | 12 | 0.3 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB2 | 12 | 0.3 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB3 | 12 | 0.3 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB1 | 12 | 0.3 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB2 | 12 | 0.3 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB3 | 12 | 0.3 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 0.3 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 0.3 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 0.3 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 0.3 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 0.3 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 0.3 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 10 | 0.3 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 10 | 0.3 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 10 | 0.3 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG11 | 20 | 0.3 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG12 | 20 | 0.3 |
| (1,2067) | 1:A:16:VAL:H | 1:A:16:VAL:HG13 | 20 | 0.3 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 3 | 0.3 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 3 | 0.3 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 3 | 0.3 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 19 | 0.3 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 19 | 0.3 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 19 | 0.3 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:173:GLY:HA2 | 7 | 0.3 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:173:GLY:HA2 | 7 | 0.3 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:173:GLY:HA2 | 7 | 0.3 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:59:ASN:HB3 | 5 | 0.3 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:59:ASN:HB3 | 5 | 0.3 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:59:ASN:HB3 | 5 | 0.3 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG21 | 3 | 0.3 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG22 | 3 | 0.3 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG23 | 3 | 0.3 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 11 | 0.3 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 11 | 0.3 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 11 | 0.3 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 14 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 14 | 0.3 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 14 | 0.3 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:138:PHE:H | 11 | 0.3 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:H | 11 | 0.3 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:138:PHE:H | 11 | 0.3 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:138:PHE:H | 15 | 0.3 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:H | 15 | 0.3 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:138:PHE:H | 15 | 0.3 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 4 | 0.3 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 4 | 0.3 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 4 | 0.3 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 4 | 0.3 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 4 | 0.3 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 4 | 0.3 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 4 | 0.3 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 4 | 0.3 |
| (1,1693) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 4 | 0.3 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 0.3 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 0.3 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 0.3 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 0.3 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 0.3 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 0.3 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 0.3 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 0.3 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 0.3 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 0.3 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 0.3 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 0.3 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 0.3 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 0.3 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 0.3 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 0.3 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 0.3 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 0.3 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HA | 16 | 0.3 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HA | 16 | 0.3 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HA | 16 | 0.3 |
| (1,1393) | 1:A:48:THR:HA | 1:A:138:PHE:HB3 | 15 | 0.3 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD3 | 2 | 0.3 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD3 | 2 | 0.3 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD3 | 2 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD2 | 2 | 0.3 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD2 | 2 | 0.3 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD2 | 2 | 0.3 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:HA | 9 | 0.3 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:HA | 9 | 0.3 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:HA | 9 | 0.3 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:HA | 19 | 0.3 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:HA | 19 | 0.3 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:HA | 19 | 0.3 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 4 | 0.3 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 4 | 0.3 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 4 | 0.3 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 14 | 0.3 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 14 | 0.3 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 14 | 0.3 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 14 | 0.3 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 14 | 0.3 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 14 | 0.3 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 14 | 0.3 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 14 | 0.3 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 14 | 0.3 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 12 | 0.3 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 12 | 0.3 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 12 | 0.3 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 19 | 0.3 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 19 | 0.3 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 19 | 0.3 |
| (1,1075) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:H | 8 | 0.3 |
| (1,985) | 1:A:61:CYS:HB3 | 1:A:127:GLY:H | 13 | 0.29 |
| (1,942) | 1:A:24:ASP:HB2 | 1:A:27:SER:H | 1 | 0.29 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 4 | 0.29 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 10 | 0.29 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 18 | 0.29 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 8 | 0.29 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 9 | 0.29 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 9 | 0.29 |
| (1,771) | 1:A:180:GLU:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 9 | 0.29 |
| (1,737) | 1:A:106:ARG:H | 1:A:106:ARG:HB2 | 7 | 0.29 |
| (1,62) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:27:SER:HB3 | 4 | 0.29 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 18 | 0.29 |
| (1,454) | 1:A:170:VAL:HG21 | 1:A:171:ASN:H | 8 | 0.29 |
| (1,454) | 1:A:170:VAL:HG22 | 1:A:171:ASN:H | 8 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,454) | 1:A:170:VAL:HG23 | 1:A:171:ASN:H | 8 | 0.29 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG21 | 20 | 0.29 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG22 | 20 | 0.29 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG23 | 20 | 0.29 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 11 | 0.29 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 11 | 0.29 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 11 | 0.29 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 11 | 0.29 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 11 | 0.29 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 11 | 0.29 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG11 | 3 | 0.29 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG12 | 3 | 0.29 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG13 | 3 | 0.29 |
| (1,3486) | 1:A:78:ILE:HG12 | 1:A:79:ASP:HB3 | 12 | 0.29 |
| (1,3238) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:176:HIS:H | 3 | 0.29 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 2 | 0.29 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 15 | 0.29 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:183:ASN:HB3 | 17 | 0.29 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:183:ASN:HB3 | 17 | 0.29 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:183:ASN:HB3 | 17 | 0.29 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 7 | 0.29 |
| (1,2923) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:62:ASP:H | 2 | 0.29 |
| (1,2743) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:75:GLY:HA3 | 12 | 0.29 |
| (1,2743) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:75:GLY:HA3 | 13 | 0.29 |
| (1,2728) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:14:GLY:HA3 | 2 | 0.29 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG21 | 20 | 0.29 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG22 | 20 | 0.29 |
| (1,2721) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:153:THR:HG23 | 20 | 0.29 |
| (1,2576) | 1:A:59:ASN:HA | 1:A:129:ASN:HD21 | 10 | 0.29 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG11 | 14 | 0.29 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG12 | 14 | 0.29 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG13 | 14 | 0.29 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB1 | 6 | 0.29 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB2 | 6 | 0.29 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB3 | 6 | 0.29 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB1 | 6 | 0.29 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB2 | 6 | 0.29 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB3 | 6 | 0.29 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB1 | 6 | 0.29 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB2 | 6 | 0.29 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB3 | 6 | 0.29 |
| (1,2211) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:136:ARG:HD2 | 5 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2211) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:136:ARG:HD2 | 5 | 0.29 |
| (1,2211) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:136:ARG:HD2 | 5 | 0.29 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 0.29 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 0.29 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 0.29 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 0.29 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 0.29 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 0.29 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:H | 7 | 0.29 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:H | 7 | 0.29 |
| (1,2110) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:H | 7 | 0.29 |
| (1,2090) | 1:A:16:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HB | 14 | 0.29 |
| (1,2090) | 1:A:16:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HB | 14 | 0.29 |
| (1,2090) | 1:A:16:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HB | 14 | 0.29 |
| (1,2066) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:52:VAL:HG21 | 6 | 0.29 |
| (1,2066) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:52:VAL:HG22 | 6 | 0.29 |
| (1,2066) | 1:A:34:LEU:HA | 1:A:52:VAL:HG23 | 6 | 0.29 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 17 | 0.29 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 17 | 0.29 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 17 | 0.29 |
| (1,1971) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:125:ASN:H | 15 | 0.29 |
| (1,1971) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:125:ASN:H | 15 | 0.29 |
| (1,1971) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:125:ASN:H | 15 | 0.29 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 10 | 0.29 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 10 | 0.29 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 10 | 0.29 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:174:THR:H | 18 | 0.29 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:174:THR:H | 18 | 0.29 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:174:THR:H | 18 | 0.29 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG21 | 12 | 0.29 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG22 | 12 | 0.29 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG23 | 12 | 0.29 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 5 | 0.29 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 5 | 0.29 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 5 | 0.29 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:59:ASN:H | 7 | 0.29 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:59:ASN:H | 7 | 0.29 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:59:ASN:H | 7 | 0.29 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:24:ASP:H | 6 | 0.29 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:24:ASP:H | 6 | 0.29 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:24:ASP:H | 6 | 0.29 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 18 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 18 | 0.29 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 18 | 0.29 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB1 | 19 | 0.29 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB2 | 19 | 0.29 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB3 | 19 | 0.29 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB1 | 19 | 0.29 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB2 | 19 | 0.29 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB3 | 19 | 0.29 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB1 | 19 | 0.29 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB2 | 19 | 0.29 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB3 | 19 | 0.29 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 0.29 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 0.29 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 0.29 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 0.29 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 0.29 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 0.29 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 0.29 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 0.29 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 0.29 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 0.29 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 0.29 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 0.29 |
| (1,1393) | 1:A:48:THR:HA | 1:A:138:PHE:HB3 | 12 | 0.29 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD3 | 11 | 0.29 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD3 | 11 | 0.29 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD3 | 11 | 0.29 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD2 | 11 | 0.29 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD2 | 11 | 0.29 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD2 | 11 | 0.29 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD3 | 19 | 0.29 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD3 | 19 | 0.29 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD3 | 19 | 0.29 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD2 | 19 | 0.29 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD2 | 19 | 0.29 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD2 | 19 | 0.29 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB3 | 20 | 0.29 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB3 | 20 | 0.29 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB3 | 20 | 0.29 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HB2 | 20 | 0.29 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HB2 | 20 | 0.29 |
| (1,1273) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HB2 | 20 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 7 | 0.29 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 7 | 0.29 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 7 | 0.29 |
| (1,1106) | 1:A:74:LEU:HB3 | 1:A:115:GLY:H | 2 | 0.29 |
| (1,1075) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:H | 12 | 0.29 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:153:THR:H | 6 | 0.29 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:153:THR:H | 6 | 0.29 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:153:THR:H | 6 | 0.29 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 6 | 0.28 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 12 | 0.28 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 19 | 0.28 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 7 | 0.28 |
| (1,764) | 1:A:91:SER:H | 1:A:91:SER:HB3 | 13 | 0.28 |
| (1,762) | 1:A:90:SER:HB3 | 1:A:91:SER:H | 13 | 0.28 |
| (1,750) | 1:A:133:PHE:HB2 | 1:A:134:GLN:H | 8 | 0.28 |
| (1,686) | 1:A:115:GLY:HA3 | 1:A:117:THR:H | 13 | 0.28 |
| (1,596) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:30:GLN:HG3 | 15 | 0.28 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 15 | 0.28 |
| (1,494) | 1:A:14:GLY:HA2 | 1:A:15:GLU:H | 1 | 0.28 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 19 | 0.28 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 19 | 0.28 |
| (1,471) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 19 | 0.28 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD1 | 12 | 0.28 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HD2 | 12 | 0.28 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD1 | 12 | 0.28 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HD2 | 12 | 0.28 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD1 | 12 | 0.28 |
| (1,3884) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HD2 | 12 | 0.28 |
| (1,3730) | 1:A:106:ARG:H | 1:A:111:LEU:HD11 | 18 | 0.28 |
| (1,3730) | 1:A:106:ARG:H | 1:A:111:LEU:HD12 | 18 | 0.28 |
| (1,3730) | 1:A:106:ARG:H | 1:A:111:LEU:HD13 | 18 | 0.28 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 0.28 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 0.28 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 0.28 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 0.28 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 0.28 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 0.28 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 0.28 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 0.28 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 0.28 |
| (1,365) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:138:PHE:H | 15 | 0.28 |
| (1,3486) | 1:A:78:ILE:HG12 | 1:A:79:ASP:HB3 | 2 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,328) | 1:A:149:ASN:HD22 | 1:A:150:ALA:H | 6 | 0.28 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG2 | 19 | 0.28 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG3 | 19 | 0.28 |
| (1,2987) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:66:ALA:H | 19 | 0.28 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:183:ASN:HB3 | 1 | 0.28 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:183:ASN:HB3 | 1 | 0.28 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:183:ASN:HB3 | 1 | 0.28 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 14 | 0.28 |
| (1,2884) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:155:LYS:HE3 | 8 | 0.28 |
| (1,2884) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:155:LYS:HE3 | 8 | 0.28 |
| (1,2884) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:155:LYS:HE3 | 8 | 0.28 |
| (1,2884) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:155:LYS:HE3 | 19 | 0.28 |
| (1,2884) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:155:LYS:HE3 | 19 | 0.28 |
| (1,2884) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:155:LYS:HE3 | 19 | 0.28 |
| (1,2743) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:75:GLY:HA3 | 4 | 0.28 |
| (1,2743) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:75:GLY:HA3 | 5 | 0.28 |
| (1,2743) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:75:GLY:HA3 | 8 | 0.28 |
| (1,2726) | 1:A:8:GLY:HA2 | 1:A:9:THR:H | 4 | 0.28 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:HA3 | 17 | 0.28 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:HA3 | 17 | 0.28 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:HA3 | 17 | 0.28 |
| (1,2682) | 1:A:162:GLY:HA2 | 1:A:164:GLY:H | 7 | 0.28 |
| (1,2327) | 1:A:170:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 12 | 0.28 |
| (1,2327) | 1:A:170:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 12 | 0.28 |
| (1,2327) | 1:A:170:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 12 | 0.28 |
| (1,2317) | 1:A:44:GLN:HA | 1:A:141:GLY:HA3 | 18 | 0.28 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 18 | 0.28 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 18 | 0.28 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 18 | 0.28 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 7 | 0.28 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 7 | 0.28 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 7 | 0.28 |
| (1,2122) | 1:A:36:GLN:HA | 1:A:180:GLU:HB2 | 15 | 0.28 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG21 | 15 | 0.28 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG22 | 15 | 0.28 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG23 | 15 | 0.28 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG21 | 15 | 0.28 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG22 | 15 | 0.28 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG23 | 15 | 0.28 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG21 | 15 | 0.28 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG22 | 15 | 0.28 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG23 | 15 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2079) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:156:VAL:HG11 | 5 | 0.28 |
| (1,2079) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:156:VAL:HG12 | 5 | 0.28 |
| (1,2079) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:156:VAL:HG13 | 5 | 0.28 |
| (1,2079) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:156:VAL:HG11 | 5 | 0.28 |
| (1,2079) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:156:VAL:HG12 | 5 | 0.28 |
| (1,2079) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:156:VAL:HG13 | 5 | 0.28 |
| (1,2079) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:156:VAL:HG11 | 5 | 0.28 |
| (1,2079) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:156:VAL:HG12 | 5 | 0.28 |
| (1,2079) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:156:VAL:HG13 | 5 | 0.28 |
| (1,2030) | 1:A:159:GLN:HA | 1:A:159:GLN:HG3 | 5 | 0.28 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 4 | 0.28 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 4 | 0.28 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 4 | 0.28 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 18 | 0.28 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 18 | 0.28 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 18 | 0.28 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 5 | 0.28 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 5 | 0.28 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 5 | 0.28 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG21 | 1 | 0.28 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG22 | 1 | 0.28 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG23 | 1 | 0.28 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG21 | 1 | 0.28 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG22 | 1 | 0.28 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG23 | 1 | 0.28 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 1 | 0.28 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 1 | 0.28 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 1 | 0.28 |
| (1,1745) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 8 | 0.28 |
| (1,1745) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 8 | 0.28 |
| (1,1745) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 8 | 0.28 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:138:PHE:H | 8 | 0.28 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:H | 8 | 0.28 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:138:PHE:H | 8 | 0.28 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:24:ASP:H | 16 | 0.28 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:24:ASP:H | 16 | 0.28 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:24:ASP:H | 16 | 0.28 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 7 | 0.28 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 7 | 0.28 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 7 | 0.28 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 20 | 0.28 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 20 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 20 | 0.28 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG21 | 16 | 0.28 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG22 | 16 | 0.28 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG23 | 16 | 0.28 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 0.28 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 0.28 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 0.28 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 0.28 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 0.28 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 0.28 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 0.28 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 0.28 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 0.28 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 10 | 0.28 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 10 | 0.28 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 10 | 0.28 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 10 | 0.28 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 10 | 0.28 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 10 | 0.28 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 10 | 0.28 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 10 | 0.28 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 10 | 0.28 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 16 | 0.28 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 16 | 0.28 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 16 | 0.28 |
| (1,1393) | 1:A:48:THR:HA | 1:A:138:PHE:HB3 | 6 | 0.28 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE22 | 6 | 0.28 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE22 | 6 | 0.28 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE22 | 6 | 0.28 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 2 | 0.28 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 2 | 0.28 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 2 | 0.28 |
| (1,1281) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HA | 4 | 0.28 |
| (1,1281) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HA | 4 | 0.28 |
| (1,1281) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HA | 4 | 0.28 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:153:THR:H | 5 | 0.28 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:153:THR:H | 5 | 0.28 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:153:THR:H | 5 | 0.28 |
| (1,1019) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:138:PHE:HB2 | 16 | 0.28 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 5 | 0.27 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 13 | 0.27 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 17 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,762) | 1:A:90:SER:HB3 | 1:A:91:SER:H | 2 | 0.27 |
| (1,737) | 1:A:106:ARG:H | 1:A:106:ARG:HB2 | 19 | 0.27 |
| (1,596) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:30:GLN:HG3 | 3 | 0.27 |
| (1,573) | 1:A:91:SER:HB2 | 1:A:93:ALA:H | 11 | 0.27 |
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 6 | 0.27 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE1 | 4 | 0.27 |
| (1,3898) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HE2 | 4 | 0.27 |
| (1,374) | 1:A:12:PHE:H | 1:A:12:PHE:HB3 | 10 | 0.27 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:33:GLN:HB3 | 2 | 0.27 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:33:GLN:HB3 | 2 | 0.27 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:33:GLN:HB3 | 2 | 0.27 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:33:GLN:HB3 | 3 | 0.27 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:33:GLN:HB3 | 3 | 0.27 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:33:GLN:HB3 | 3 | 0.27 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:33:GLN:HB3 | 4 | 0.27 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:33:GLN:HB3 | 4 | 0.27 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:33:GLN:HB3 | 4 | 0.27 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 20 | 0.27 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 4 | 0.27 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 4 | 0.27 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 4 | 0.27 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 4 | 0.27 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 4 | 0.27 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 4 | 0.27 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 20 | 0.27 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 20 | 0.27 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 20 | 0.27 |
| (1,3328) | 1:A:62:ASP:HB2 | 1:A:65:VAL:HB | 5 | 0.27 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD11 | 5 | 0.27 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD12 | 5 | 0.27 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD13 | 5 | 0.27 |
| (1,2987) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:66:ALA:H | 11 | 0.27 |
| (1,2923) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:62:ASP:H | 17 | 0.27 |
| (1,2884) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:155:LYS:HE3 | 11 | 0.27 |
| (1,2884) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:155:LYS:HE3 | 11 | 0.27 |
| (1,2884) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:155:LYS:HE3 | 11 | 0.27 |
| (1,2761) | 1:A:24:ASP:HB3 | 1:A:59:ASN:HD21 | 17 | 0.27 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 18 | 0.27 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD11 | 18 | 0.27 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD12 | 18 | 0.27 |
| (1,2748) | 1:A:75:GLY:HA2 | 1:A:86:LEU:HD13 | 18 | 0.27 |
| (1,2743) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:75:GLY:HA3 | 6 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2743) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:75:GLY:HA3 | 11 | 0.27 |
| (1,2743) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:75:GLY:HA3 | 16 | 0.27 |
| (1,2726) | 1:A:8:GLY:HA2 | 1:A:9:THR:H | 13 | 0.27 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD11 | 2 | 0.27 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD12 | 2 | 0.27 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD13 | 2 | 0.27 |
| (1,2419) | 1:A:129:ASN:HA | 1:A:129:ASN:HD22 | 8 | 0.27 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB1 | 16 | 0.27 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB2 | 16 | 0.27 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB3 | 16 | 0.27 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB1 | 16 | 0.27 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB2 | 16 | 0.27 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB3 | 16 | 0.27 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB1 | 16 | 0.27 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB2 | 16 | 0.27 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB3 | 16 | 0.27 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB1 | 20 | 0.27 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB2 | 20 | 0.27 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB3 | 20 | 0.27 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB1 | 20 | 0.27 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB2 | 20 | 0.27 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB3 | 20 | 0.27 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB1 | 20 | 0.27 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB2 | 20 | 0.27 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB3 | 20 | 0.27 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 9 | 0.27 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 9 | 0.27 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 9 | 0.27 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 0.27 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 0.27 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 0.27 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 19 | 0.27 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 19 | 0.27 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 19 | 0.27 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:59:ASN:HB3 | 11 | 0.27 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:59:ASN:HB3 | 11 | 0.27 |
| (1,1835) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:59:ASN:HB3 | 11 | 0.27 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 17 | 0.27 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 17 | 0.27 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 17 | 0.27 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:138:PHE:H | 7 | 0.27 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:H | 7 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:138:PHE:H | 7 | 0.27 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:49:SER:H | 10 | 0.27 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:49:SER:H | 10 | 0.27 |
| (1,1671) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:49:SER:H | 10 | 0.27 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 17 | 0.27 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 17 | 0.27 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 17 | 0.27 |
| (1,1583) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:119:SER:H | 10 | 0.27 |
| (1,1583) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:119:SER:H | 10 | 0.27 |
| (1,1583) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:119:SER:H | 10 | 0.27 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 0.27 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 0.27 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 0.27 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 0.27 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 0.27 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 0.27 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 16 | 0.27 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 16 | 0.27 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 16 | 0.27 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:145:PRO:HG2 | 2 | 0.27 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:145:PRO:HG2 | 2 | 0.27 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:145:PRO:HG2 | 2 | 0.27 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 14 | 0.27 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 14 | 0.27 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 14 | 0.27 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 6 | 0.27 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 6 | 0.27 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 6 | 0.27 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:131:ILE:HG13 | 16 | 0.27 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:131:ILE:HG13 | 16 | 0.27 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:131:ILE:HG13 | 16 | 0.27 |
| (1,1215) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 13 | 0.27 |
| (1,1215) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 13 | 0.27 |
| (1,1215) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 13 | 0.27 |
| (1,1075) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:H | 16 | 0.27 |
| (1,1075) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:H | 20 | 0.27 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:153:THR:H | 11 | 0.27 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:153:THR:H | 11 | 0.27 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:153:THR:H | 11 | 0.27 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 20 | 0.26 |
| (1,826) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:84:ASN:H | 19 | 0.26 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 17 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,762) | 1:A:90:SER:HB3 | 1:A:91:SER:H | 3 | 0.26 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 13 | 0.26 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 13 | 0.26 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 13 | 0.26 |
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 1 | 0.26 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:H | 3 | 0.26 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:H | 3 | 0.26 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:H | 3 | 0.26 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:H | 17 | 0.26 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:H | 17 | 0.26 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:H | 17 | 0.26 |
| (1,3775) | 1:A:106:ARG:HG3 | 1:A:120:SER:HB2 | 7 | 0.26 |
| (1,365) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:138:PHE:H | 11 | 0.26 |
| (1,365) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:138:PHE:H | 19 | 0.26 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:33:GLN:HB3 | 10 | 0.26 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:33:GLN:HB3 | 10 | 0.26 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:33:GLN:HB3 | 10 | 0.26 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:33:GLN:HB3 | 15 | 0.26 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:33:GLN:HB3 | 15 | 0.26 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:33:GLN:HB3 | 15 | 0.26 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:33:GLN:HB3 | 19 | 0.26 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:33:GLN:HB3 | 19 | 0.26 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:33:GLN:HB3 | 19 | 0.26 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 13 | 0.26 |
| (1,3631) | 1:A:145:PRO:HG3 | 1:A:146:GLY:H | 1 | 0.26 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 12 | 0.26 |
| (1,3328) | 1:A:62:ASP:HB2 | 1:A:65:VAL:HB | 1 | 0.26 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG2 | 5 | 0.26 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG3 | 5 | 0.26 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG2 | 20 | 0.26 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG3 | 20 | 0.26 |
| (1,2987) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:66:ALA:H | 9 | 0.26 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 11 | 0.26 |
| (1,2923) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:62:ASP:H | 18 | 0.26 |
| (1,2857) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:111:LEU:HG | 10 | 0.26 |
| (1,2780) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA2 | 16 | 0.26 |
| (1,2743) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:75:GLY:HA3 | 1 | 0.26 |
| (1,2743) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:75:GLY:HA3 | 15 | 0.26 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:HA3 | 6 | 0.26 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:HA3 | 6 | 0.26 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:HA3 | 6 | 0.26 |
| (1,262) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,262) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 0.26 |
| (1,262) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 0.26 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 5 | 0.26 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 5 | 0.26 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 5 | 0.26 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 0.26 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 0.26 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 0.26 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 14 | 0.26 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 14 | 0.26 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 14 | 0.26 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG21 | 7 | 0.26 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG22 | 7 | 0.26 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG23 | 7 | 0.26 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG21 | 10 | 0.26 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG22 | 10 | 0.26 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG23 | 10 | 0.26 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 18 | 0.26 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 18 | 0.26 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 18 | 0.26 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 20 | 0.26 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 20 | 0.26 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 20 | 0.26 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 0.26 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 0.26 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 0.26 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 0.26 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 0.26 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 0.26 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 0.26 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 0.26 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 0.26 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 0.26 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 0.26 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 0.26 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 0.26 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 0.26 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 0.26 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 0.26 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 0.26 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 0.26 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 0.26 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 0.26 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 20 | 0.26 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 20 | 0.26 |
| (1,1521) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 20 | 0.26 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HA | 6 | 0.26 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HA | 6 | 0.26 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HA | 6 | 0.26 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 8 | 0.26 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 8 | 0.26 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 8 | 0.26 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 15 | 0.26 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 15 | 0.26 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 15 | 0.26 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 15 | 0.26 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 15 | 0.26 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 15 | 0.26 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.26 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.26 |
| (1,126) | 1:A:96:ALA:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.26 |
| (1,1215) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 5 | 0.26 |
| (1,1215) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 5 | 0.26 |
| (1,1215) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 5 | 0.26 |
| (1,1080) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:GLY:HA3 | 12 | 0.26 |
| (1,857) | 1:A:49:SER:H | 1:A:136:ARG:HD3 | 3 | 0.25 |
| (1,857) | 1:A:49:SER:H | 1:A:136:ARG:HD3 | 7 | 0.25 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 14 | 0.25 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 16 | 0.25 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 16 | 0.25 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 16 | 0.25 |
| (1,596) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:30:GLN:HG3 | 2 | 0.25 |
| (1,596) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:30:GLN:HG3 | 10 | 0.25 |
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 4 | 0.25 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 4 | 0.25 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 4 | 0.25 |
| (1,3940) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 4 | 0.25 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 16 | 0.25 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 16 | 0.25 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG13 | 17 | 0.25 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG13 | 17 | 0.25 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG13 | 17 | 0.25 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 1 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3540) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 6 | 0.25 |
| (1,3382) | 1:A:95:SER:HB2 | 1:A:96:ALA:HB1 | 17 | 0.25 |
| (1,3382) | 1:A:95:SER:HB2 | 1:A:96:ALA:HB2 | 17 | 0.25 |
| (1,3382) | 1:A:95:SER:HB2 | 1:A:96:ALA:HB3 | 17 | 0.25 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 8 | 0.25 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 16 | 0.25 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 19 | 0.25 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG2 | 16 | 0.25 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG3 | 16 | 0.25 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB3 | 9 | 0.25 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB3 | 9 | 0.25 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB3 | 9 | 0.25 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD11 | 7 | 0.25 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD12 | 7 | 0.25 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD13 | 7 | 0.25 |
| (1,3042) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:172:GLY:H | 3 | 0.25 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:183:ASN:HB3 | 4 | 0.25 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:183:ASN:HB3 | 4 | 0.25 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:183:ASN:HB3 | 4 | 0.25 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:183:ASN:HB3 | 16 | 0.25 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:183:ASN:HB3 | 16 | 0.25 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:183:ASN:HB3 | 16 | 0.25 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 3 | 0.25 |
| (1,2923) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:62:ASP:H | 5 | 0.25 |
| (1,2923) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:62:ASP:H | 13 | 0.25 |
| (1,2813) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:124:LEU:HD21 | 9 | 0.25 |
| (1,2813) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:124:LEU:HD22 | 9 | 0.25 |
| (1,2813) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:124:LEU:HD23 | 9 | 0.25 |
| (1,2791) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:46:GLY:HA2 | 17 | 0.25 |
| (1,2791) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:46:GLY:HA2 | 19 | 0.25 |
| (1,2787) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HD1 | 16 | 0.25 |
| (1,2787) | 1:A:46:GLY:HA3 | 1:A:138:PHE:HD2 | 16 | 0.25 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 5 | 0.25 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 11 | 0.25 |
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 18 | 0.25 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:51:ALA:HA | 18 | 0.25 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:51:ALA:HA | 18 | 0.25 |
| (1,2481) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:51:ALA:HA | 18 | 0.25 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG21 | 2 | 0.25 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG22 | 2 | 0.25 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG23 | 2 | 0.25 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG21 | 2 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG22 | 2 | 0.25 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG23 | 2 | 0.25 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG21 | 2 | 0.25 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG22 | 2 | 0.25 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG23 | 2 | 0.25 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG21 | 19 | 0.25 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG22 | 19 | 0.25 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG23 | 19 | 0.25 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG21 | 19 | 0.25 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG22 | 19 | 0.25 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG23 | 19 | 0.25 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG21 | 19 | 0.25 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG22 | 19 | 0.25 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG23 | 19 | 0.25 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HG11 | 20 | 0.25 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HG12 | 20 | 0.25 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HG13 | 20 | 0.25 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HG11 | 20 | 0.25 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HG12 | 20 | 0.25 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HG13 | 20 | 0.25 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HG11 | 20 | 0.25 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HG12 | 20 | 0.25 |
| (1,2179) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HG13 | 20 | 0.25 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 0.25 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 0.25 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 0.25 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 0.25 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 0.25 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 0.25 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG11 | 8 | 0.25 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG12 | 8 | 0.25 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:170:VAL:HG13 | 8 | 0.25 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG11 | 8 | 0.25 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG12 | 8 | 0.25 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:170:VAL:HG13 | 8 | 0.25 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG11 | 8 | 0.25 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG12 | 8 | 0.25 |
| (1,2118) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:170:VAL:HG13 | 8 | 0.25 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 7 | 0.25 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 7 | 0.25 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 7 | 0.25 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 8 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 8 | 0.25 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 8 | 0.25 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 9 | 0.25 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 9 | 0.25 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 9 | 0.25 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 13 | 0.25 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 13 | 0.25 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 13 | 0.25 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 18 | 0.25 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 18 | 0.25 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 18 | 0.25 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG21 | 5 | 0.25 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG22 | 5 | 0.25 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG23 | 5 | 0.25 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG21 | 20 | 0.25 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG22 | 20 | 0.25 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG23 | 20 | 0.25 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:HB2 | 2 | 0.25 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:HB2 | 2 | 0.25 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:HB2 | 2 | 0.25 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG21 | 13 | 0.25 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG22 | 13 | 0.25 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG23 | 13 | 0.25 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG21 | 13 | 0.25 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG22 | 13 | 0.25 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG23 | 13 | 0.25 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG21 | 13 | 0.25 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG22 | 13 | 0.25 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG23 | 13 | 0.25 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB1 | 19 | 0.25 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB2 | 19 | 0.25 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB3 | 19 | 0.25 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB1 | 19 | 0.25 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB2 | 19 | 0.25 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB3 | 19 | 0.25 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB1 | 19 | 0.25 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB2 | 19 | 0.25 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB3 | 19 | 0.25 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:H | 7 | 0.25 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:H | 7 | 0.25 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:H | 7 | 0.25 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD3 | 9 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD3 | 9 | 0.25 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD3 | 9 | 0.25 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD2 | 9 | 0.25 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD2 | 9 | 0.25 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD2 | 9 | 0.25 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:H | 15 | 0.25 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:H | 15 | 0.25 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:H | 15 | 0.25 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 3 | 0.25 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 3 | 0.25 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 3 | 0.25 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 3 | 0.25 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 3 | 0.25 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 3 | 0.25 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 3 | 0.25 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 3 | 0.25 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 3 | 0.25 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:124:LEU:HD11 | 10 | 0.25 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:124:LEU:HD12 | 10 | 0.25 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:124:LEU:HD13 | 10 | 0.25 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:124:LEU:HD11 | 10 | 0.25 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:124:LEU:HD12 | 10 | 0.25 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:124:LEU:HD13 | 10 | 0.25 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:124:LEU:HD11 | 10 | 0.25 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:124:LEU:HD12 | 10 | 0.25 |
| (1,1313) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:124:LEU:HD13 | 10 | 0.25 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 12 | 0.25 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 12 | 0.25 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 12 | 0.25 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 19 | 0.25 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 19 | 0.25 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 19 | 0.25 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 11 | 0.25 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 11 | 0.25 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 11 | 0.25 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:131:ILE:HG13 | 15 | 0.25 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:131:ILE:HG13 | 15 | 0.25 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:131:ILE:HG13 | 15 | 0.25 |
| (1,1106) | 1:A:74:LEU:HB3 | 1:A:115:GLY:H | 3 | 0.25 |
| (1,1080) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:GLY:HA3 | 19 | 0.25 |
| (1,1075) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:H | 1 | 0.25 |
| (1,1075) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:H | 14 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1019) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:138:PHE:HB2 | 13 | 0.25 |
| (1,857) | 1:A:49:SER:H | 1:A:136:ARG:HD3 | 11 | 0.24 |
| (1,857) | 1:A:49:SER:H | 1:A:136:ARG:HD3 | 19 | 0.24 |
| (1,750) | 1:A:133:PHE:HB2 | 1:A:134:GLN:H | 16 | 0.24 |
| (1,750) | 1:A:133:PHE:HB2 | 1:A:134:GLN:H | 19 | 0.24 |
| (1,596) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:30:GLN:HG3 | 7 | 0.24 |
| (1,596) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:30:GLN:HG3 | 8 | 0.24 |
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 10 | 0.24 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 9 | 0.24 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 9 | 0.24 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 9 | 0.24 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 9 | 0.24 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 9 | 0.24 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 9 | 0.24 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG21 | 15 | 0.24 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG22 | 15 | 0.24 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG23 | 15 | 0.24 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:33:GLN:HB3 | 6 | 0.24 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:33:GLN:HB3 | 6 | 0.24 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:33:GLN:HB3 | 6 | 0.24 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:33:GLN:HB3 | 7 | 0.24 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:33:GLN:HB3 | 7 | 0.24 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:33:GLN:HB3 | 7 | 0.24 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 8 | 0.24 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 14 | 0.24 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 19 | 0.24 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 20 | 0.24 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 20 | 0.24 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 20 | 0.24 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 20 | 0.24 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 20 | 0.24 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 20 | 0.24 |
| (1,3580) | 1:A:168:THR:HA | 1:A:170:VAL:HG21 | 11 | 0.24 |
| (1,3580) | 1:A:168:THR:HA | 1:A:170:VAL:HG22 | 11 | 0.24 |
| (1,3580) | 1:A:168:THR:HA | 1:A:170:VAL:HG23 | 11 | 0.24 |
| (1,3540) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 11 | 0.24 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB1 | 8 | 0.24 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB2 | 8 | 0.24 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB3 | 8 | 0.24 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG2 | 1 | 0.24 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG3 | 1 | 0.24 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG2 | 4 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG3 | 4 | 0.24 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HB | 15 | 0.24 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HB | 15 | 0.24 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HB | 15 | 0.24 |
| (1,3042) | 1:A:155:LYS:HB2 | 1:A:172:GLY:H | 17 | 0.24 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:183:ASN:HB3 | 3 | 0.24 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:183:ASN:HB3 | 3 | 0.24 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:183:ASN:HB3 | 3 | 0.24 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:183:ASN:HB3 | 9 | 0.24 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:183:ASN:HB3 | 9 | 0.24 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:183:ASN:HB3 | 9 | 0.24 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:183:ASN:HB3 | 11 | 0.24 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:183:ASN:HB3 | 11 | 0.24 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:183:ASN:HB3 | 11 | 0.24 |
| (1,2924) | 1:A:59:ASN:HB2 | 1:A:128:THR:HA | 8 | 0.24 |
| (1,2886) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:171:ASN:HA | 19 | 0.24 |
| (1,2791) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:46:GLY:HA2 | 5 | 0.24 |
| (1,2780) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA2 | 2 | 0.24 |
| (1,2761) | 1:A:24:ASP:HB3 | 1:A:59:ASN:HD21 | 12 | 0.24 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 16 | 0.24 |
| (1,2743) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:75:GLY:HA3 | 7 | 0.24 |
| (1,2743) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:75:GLY:HA3 | 17 | 0.24 |
| (1,2702) | 1:A:159:GLN:HG2 | 1:A:160:GLY:HA3 | 2 | 0.24 |
| (1,2572) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:129:ASN:HD22 | 10 | 0.24 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB1 | 1:A:149:ASN:HD21 | 15 | 0.24 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB2 | 1:A:149:ASN:HD21 | 15 | 0.24 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB3 | 1:A:149:ASN:HD21 | 15 | 0.24 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 10 | 0.24 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 10 | 0.24 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 10 | 0.24 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG21 | 7 | 0.24 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG22 | 7 | 0.24 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:175:VAL:HG23 | 7 | 0.24 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG21 | 7 | 0.24 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG22 | 7 | 0.24 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:175:VAL:HG23 | 7 | 0.24 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG21 | 7 | 0.24 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG22 | 7 | 0.24 |
| (1,2180) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:175:VAL:HG23 | 7 | 0.24 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 4 | 0.24 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 4 | 0.24 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 4 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 0.24 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 0.24 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 0.24 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 0.24 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 0.24 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 0.24 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 16 | 0.24 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 16 | 0.24 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 16 | 0.24 |
| (1,2030) | 1:A:159:GLN:HA | 1:A:159:GLN:HG3 | 13 | 0.24 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 10 | 0.24 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 10 | 0.24 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 10 | 0.24 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 16 | 0.24 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 16 | 0.24 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 16 | 0.24 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 4 | 0.24 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 4 | 0.24 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 4 | 0.24 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 14 | 0.24 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 14 | 0.24 |
| (1,1853) | 1:A:62:ASP:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 14 | 0.24 |
| (1,1826) | 1:A:89:GLN:HA | 1:A:90:SER:HB2 | 4 | 0.24 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG21 | 9 | 0.24 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG22 | 9 | 0.24 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG23 | 9 | 0.24 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:156:VAL:HG21 | 8 | 0.24 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:156:VAL:HG22 | 8 | 0.24 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:156:VAL:HG23 | 8 | 0.24 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:156:VAL:HG21 | 8 | 0.24 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:156:VAL:HG22 | 8 | 0.24 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:156:VAL:HG23 | 8 | 0.24 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:156:VAL:HG21 | 8 | 0.24 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:156:VAL:HG22 | 8 | 0.24 |
| (1,1793) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:156:VAL:HG23 | 8 | 0.24 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 10 | 0.24 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 10 | 0.24 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 10 | 0.24 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 3 | 0.24 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 3 | 0.24 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 3 | 0.24 |
| (1,1720) | 1:A:24:ASP:HA | 1:A:59:ASN:HB2 | 15 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:H | 11 | 0.24 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:H | 11 | 0.24 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:H | 11 | 0.24 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD11 | 9 | 0.24 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD12 | 9 | 0.24 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD13 | 9 | 0.24 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD21 | 9 | 0.24 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD22 | 9 | 0.24 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD23 | 9 | 0.24 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD11 | 9 | 0.24 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD12 | 9 | 0.24 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD13 | 9 | 0.24 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD21 | 9 | 0.24 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD22 | 9 | 0.24 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD23 | 9 | 0.24 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD11 | 9 | 0.24 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD12 | 9 | 0.24 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD13 | 9 | 0.24 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD21 | 9 | 0.24 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD22 | 9 | 0.24 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD23 | 9 | 0.24 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 9 | 0.24 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 9 | 0.24 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 9 | 0.24 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 20 | 0.24 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 20 | 0.24 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 20 | 0.24 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 20 | 0.24 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 20 | 0.24 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 20 | 0.24 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 20 | 0.24 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 20 | 0.24 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 20 | 0.24 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:74:LEU:HD21 | 11 | 0.24 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:74:LEU:HD22 | 11 | 0.24 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:74:LEU:HD23 | 11 | 0.24 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:74:LEU:HD21 | 11 | 0.24 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:74:LEU:HD22 | 11 | 0.24 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:74:LEU:HD23 | 11 | 0.24 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 11 | 0.24 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 11 | 0.24 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 11 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:ASN:H | 8 | 0.24 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:ASN:H | 8 | 0.24 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:ASN:H | 8 | 0.24 |
| (1,1316) | 1:A:27:SER:HA | 1:A:30:GLN:HG3 | 18 | 0.24 |
| (1,1310) | 1:A:67:SER:HA | 1:A:124:LEU:HD11 | 10 | 0.24 |
| (1,1310) | 1:A:67:SER:HA | 1:A:124:LEU:HD12 | 10 | 0.24 |
| (1,1310) | 1:A:67:SER:HA | 1:A:124:LEU:HD13 | 10 | 0.24 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 9 | 0.24 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 9 | 0.24 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 9 | 0.24 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 9 | 0.24 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 9 | 0.24 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 9 | 0.24 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 10 | 0.24 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 10 | 0.24 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 10 | 0.24 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 10 | 0.24 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 10 | 0.24 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 10 | 0.24 |
| (1,1297) | 1:A:120:SER:HA | 1:A:121:GLU:HG3 | 18 | 0.24 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 20 | 0.24 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 20 | 0.24 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 20 | 0.24 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:131:ILE:HG13 | 17 | 0.24 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:131:ILE:HG13 | 17 | 0.24 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:131:ILE:HG13 | 17 | 0.24 |
| (1,957) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:171:ASN:HD21 | 8 | 0.23 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 2 | 0.23 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 3 | 0.23 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 3 | 0.23 |
| (1,764) | 1:A:91:SER:H | 1:A:91:SER:HB3 | 5 | 0.23 |
| (1,737) | 1:A:106:ARG:H | 1:A:106:ARG:HB2 | 8 | 0.23 |
| (1,528) | 1:A:126:ASN:H | 1:A:126:ASN:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 4 | 0.23 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 4 | 0.23 |
| (1,491) | 1:A:155:LYS:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 4 | 0.23 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 11 | 0.23 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 11 | 0.23 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 11 | 0.23 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 11 | 0.23 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 11 | 0.23 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 11 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:155:LYS:HE3 | 12 | 0.23 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:155:LYS:HE3 | 12 | 0.23 |
| (1,3788) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:155:LYS:HE3 | 12 | 0.23 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:H | 20 | 0.23 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:H | 20 | 0.23 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:H | 20 | 0.23 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 0.23 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 0.23 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 0.23 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 0.23 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 0.23 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 0.23 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 0.23 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 0.23 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 0.23 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 0.23 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 0.23 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 0.23 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 0.23 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 0.23 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 0.23 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 14 | 0.23 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 14 | 0.23 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 14 | 0.23 |
| (1,365) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:138:PHE:H | 1 | 0.23 |
| (1,3398) | 1:A:28:VAL:HA | 1:A:173:GLY:HA2 | 14 | 0.23 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 3 | 0.23 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB1 | 4 | 0.23 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB2 | 4 | 0.23 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB3 | 4 | 0.23 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB1 | 9 | 0.23 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB2 | 9 | 0.23 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB3 | 9 | 0.23 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB1 | 14 | 0.23 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB2 | 14 | 0.23 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB3 | 14 | 0.23 |
| (1,3265) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:145:PRO:HD2 | 10 | 0.23 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB2 | 20 | 0.23 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB2 | 20 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB2 | 20 | 0.23 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB3 | 11 | 0.23 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB3 | 11 | 0.23 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB3 | 11 | 0.23 |
| (1,3162) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HB3 | 20 | 0.23 |
| (1,3058) | 1:A:121:GLU:HG2 | 1:A:122:THR:H | 18 | 0.23 |
| (1,2924) | 1:A:59:ASN:HB2 | 1:A:128:THR:HA | 9 | 0.23 |
| (1,2923) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:62:ASP:H | 9 | 0.23 |
| (1,2912) | 1:A:62:ASP:HB2 | 1:A:65:VAL:H | 19 | 0.23 |
| (1,2780) | 1:A:33:GLN:HB2 | 1:A:35:GLY:HA2 | 4 | 0.23 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 4 | 0.23 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD11 | 16 | 0.23 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD12 | 16 | 0.23 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD13 | 16 | 0.23 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 3 | 0.23 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 3 | 0.23 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 3 | 0.23 |
| (1,2398) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:110:ALA:HB1 | 13 | 0.23 |
| (1,2398) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:110:ALA:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,2398) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:110:ALA:HB3 | 13 | 0.23 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG21 | 5 | 0.23 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG22 | 5 | 0.23 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG23 | 5 | 0.23 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG21 | 5 | 0.23 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG22 | 5 | 0.23 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG23 | 5 | 0.23 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG21 | 5 | 0.23 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG22 | 5 | 0.23 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG23 | 5 | 0.23 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:171:ASN:HA | 11 | 0.23 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:171:ASN:HA | 11 | 0.23 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:171:ASN:HA | 11 | 0.23 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 13 | 0.23 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 13 | 0.23 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 13 | 0.23 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 6 | 0.23 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 6 | 0.23 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 6 | 0.23 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE21 | 18 | 0.23 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE21 | 18 | 0.23 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE21 | 18 | 0.23 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE22 | 18 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE22 | 18 | 0.23 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE22 | 18 | 0.23 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 11 | 0.23 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 11 | 0.23 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 11 | 0.23 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 17 | 0.23 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 17 | 0.23 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 17 | 0.23 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG21 | 17 | 0.23 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG22 | 17 | 0.23 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG23 | 17 | 0.23 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG21 | 17 | 0.23 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG22 | 17 | 0.23 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG23 | 17 | 0.23 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 17 | 0.23 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 17 | 0.23 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 17 | 0.23 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 11 | 0.23 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 11 | 0.23 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 11 | 0.23 |
| (1,1720) | 1:A:24:ASP:HA | 1:A:59:ASN:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 4 | 0.23 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 4 | 0.23 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 4 | 0.23 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 6 | 0.23 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 6 | 0.23 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 6 | 0.23 |
| (1,1619) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:112:THR:HG21 | 5 | 0.23 |
| (1,1619) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:112:THR:HG22 | 5 | 0.23 |
| (1,1619) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:112:THR:HG23 | 5 | 0.23 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB1 | 7 | 0.23 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB3 | 7 | 0.23 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB1 | 7 | 0.23 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB3 | 7 | 0.23 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB1 | 7 | 0.23 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB3 | 7 | 0.23 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 0.23 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 0.23 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 0.23 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 0.23 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 0.23 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 2 | 0.23 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 2 | 0.23 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 2 | 0.23 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 0.23 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 0.23 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 0.23 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 0.23 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 0.23 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 0.23 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 0.23 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 0.23 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 0.23 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:ASN:H | 3 | 0.23 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:ASN:H | 3 | 0.23 |
| (1,1518) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:ASN:H | 3 | 0.23 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HA | 3 | 0.23 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HA | 3 | 0.23 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HA | 3 | 0.23 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 1 | 0.23 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 1 | 0.23 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 1 | 0.23 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 13 | 0.23 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 13 | 0.23 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 13 | 0.23 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 15 | 0.23 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 15 | 0.23 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 15 | 0.23 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 6 | 0.23 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 6 | 0.23 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 6 | 0.23 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 6 | 0.23 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 6 | 0.23 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 6 | 0.23 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 6 | 0.23 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 6 | 0.23 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 6 | 0.23 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HA | 1 | 0.23 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HA | 1 | 0.23 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HA | 1 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1019) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:138:PHE:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,764) | 1:A:91:SER:H | 1:A:91:SER:HB3 | 14 | 0.22 |
| (1,62) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:27:SER:HB3 | 5 | 0.22 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:57:GLN:H | 3 | 0.22 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:57:GLN:H | 3 | 0.22 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:57:GLN:H | 3 | 0.22 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE1 | 1 | 0.22 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE2 | 1 | 0.22 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 11 | 0.22 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 11 | 0.22 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 11 | 0.22 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 11 | 0.22 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 11 | 0.22 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 11 | 0.22 |
| (1,3486) | 1:A:78:ILE:HG12 | 1:A:79:ASP:HB3 | 11 | 0.22 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 2 | 0.22 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 4 | 0.22 |
| (1,3283) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:159:GLN:HG3 | 13 | 0.22 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB1 | 3 | 0.22 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB2 | 3 | 0.22 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB3 | 3 | 0.22 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB1 | 15 | 0.22 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB2 | 15 | 0.22 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB3 | 15 | 0.22 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB1 | 20 | 0.22 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB2 | 20 | 0.22 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB3 | 20 | 0.22 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB2 | 10 | 0.22 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB2 | 10 | 0.22 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB2 | 10 | 0.22 |
| (1,3165) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HB2 | 2 | 0.22 |
| (1,3058) | 1:A:121:GLU:HG2 | 1:A:122:THR:H | 9 | 0.22 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB3 | 14 | 0.22 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB3 | 14 | 0.22 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB3 | 14 | 0.22 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 13 | 0.22 |
| (1,2743) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:75:GLY:HA3 | 19 | 0.22 |
| (1,2711) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HB2 | 10 | 0.22 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD11 | 4 | 0.22 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD12 | 4 | 0.22 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD13 | 4 | 0.22 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG11 | 1 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG12 | 1 | 0.22 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG13 | 1 | 0.22 |
| (1,2030) | 1:A:159:GLN:HA | 1:A:159:GLN:HG3 | 3 | 0.22 |
| (1,2030) | 1:A:159:GLN:HA | 1:A:159:GLN:HG3 | 11 | 0.22 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 12 | 0.22 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 12 | 0.22 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 12 | 0.22 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 6 | 0.22 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 6 | 0.22 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 6 | 0.22 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:174:THR:H | 10 | 0.22 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:174:THR:H | 10 | 0.22 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:174:THR:H | 10 | 0.22 |
| (1,1833) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:59:ASN:HD22 | 5 | 0.22 |
| (1,1833) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:59:ASN:HD22 | 5 | 0.22 |
| (1,1833) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:59:ASN:HD22 | 5 | 0.22 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG21 | 17 | 0.22 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG22 | 17 | 0.22 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG23 | 17 | 0.22 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:HB2 | 10 | 0.22 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:HB2 | 10 | 0.22 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:HB2 | 10 | 0.22 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG21 | 6 | 0.22 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG22 | 6 | 0.22 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG23 | 6 | 0.22 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG21 | 6 | 0.22 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG22 | 6 | 0.22 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG23 | 6 | 0.22 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG21 | 6 | 0.22 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG22 | 6 | 0.22 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG23 | 6 | 0.22 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 5 | 0.22 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 5 | 0.22 |
| (1,1747) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 5 | 0.22 |
| (1,1725) | 1:A:59:ASN:HB2 | 1:A:128:THR:HG21 | 1 | 0.22 |
| (1,1725) | 1:A:59:ASN:HB2 | 1:A:128:THR:HG22 | 1 | 0.22 |
| (1,1725) | 1:A:59:ASN:HB2 | 1:A:128:THR:HG23 | 1 | 0.22 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:138:PHE:H | 10 | 0.22 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:H | 10 | 0.22 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:138:PHE:H | 10 | 0.22 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:H | 8 | 0.22 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:H | 8 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:H | 8 | 0.22 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 19 | 0.22 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 19 | 0.22 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 19 | 0.22 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB1 | 6 | 0.22 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB2 | 6 | 0.22 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB3 | 6 | 0.22 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB1 | 6 | 0.22 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB2 | 6 | 0.22 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB3 | 6 | 0.22 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB1 | 6 | 0.22 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB2 | 6 | 0.22 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB3 | 6 | 0.22 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:145:PRO:HG2 | 20 | 0.22 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:145:PRO:HG2 | 20 | 0.22 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:145:PRO:HG2 | 20 | 0.22 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD3 | 7 | 0.22 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD3 | 7 | 0.22 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD3 | 7 | 0.22 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD2 | 7 | 0.22 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD2 | 7 | 0.22 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD2 | 7 | 0.22 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD3 | 16 | 0.22 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD3 | 16 | 0.22 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD3 | 16 | 0.22 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD2 | 16 | 0.22 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD2 | 16 | 0.22 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD2 | 16 | 0.22 |
| (1,1075) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:H | 6 | 0.22 |
| (1,1075) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:H | 19 | 0.22 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 1 | 0.21 |
| (1,857) | 1:A:49:SER:H | 1:A:136:ARG:HD3 | 2 | 0.21 |
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 7 | 0.21 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 6 | 0.21 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 6 | 0.21 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 6 | 0.21 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 6 | 0.21 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 6 | 0.21 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 6 | 0.21 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:H | 13 | 0.21 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:H | 13 | 0.21 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:H | 13 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:33:GLN:HB3 | 16 | 0.21 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:33:GLN:HB3 | 16 | 0.21 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:33:GLN:HB3 | 16 | 0.21 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 17 | 0.21 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 14 | 0.21 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 14 | 0.21 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 14 | 0.21 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 14 | 0.21 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 14 | 0.21 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 14 | 0.21 |
| (1,3540) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 1 | 0.21 |
| (1,3486) | 1:A:78:ILE:HG12 | 1:A:79:ASP:HB3 | 8 | 0.21 |
| (1,3469) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:112:THR:HA | 6 | 0.21 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 14 | 0.21 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB2 | 14 | 0.21 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB2 | 14 | 0.21 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB2 | 14 | 0.21 |
| (1,3324) | 1:A:71:VAL:H | 1:A:119:SER:HB3 | 10 | 0.21 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB1 | 2 | 0.21 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB2 | 2 | 0.21 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB3 | 2 | 0.21 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB1 | 5 | 0.21 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB2 | 5 | 0.21 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB3 | 5 | 0.21 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB1 | 6 | 0.21 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB3 | 6 | 0.21 |
| (1,3219) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:180:GLU:HB2 | 19 | 0.21 |
| (1,3219) | 1:A:36:GLN:HG2 | 1:A:180:GLU:HB2 | 19 | 0.21 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB3 | 4 | 0.21 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB3 | 4 | 0.21 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB3 | 4 | 0.21 |
| (1,3055) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:121:GLU:HG3 | 10 | 0.21 |
| (1,3055) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:121:GLU:HG3 | 10 | 0.21 |
| (1,3055) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:121:GLU:HG3 | 10 | 0.21 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 3 | 0.21 |
| (1,2987) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:66:ALA:H | 1 | 0.21 |
| (1,2987) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:66:ALA:H | 4 | 0.21 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG11 | 5 | 0.21 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG12 | 5 | 0.21 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:65:VAL:HG13 | 5 | 0.21 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG11 | 5 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG12 | 5 | 0.21 |
| (1,2967) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:65:VAL:HG13 | 5 | 0.21 |
| (1,2886) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:171:ASN:HA | 8 | 0.21 |
| (1,2791) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:46:GLY:HA2 | 10 | 0.21 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 1 | 0.21 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 14 | 0.21 |
| (1,2726) | 1:A:8:GLY:HA2 | 1:A:9:THR:H | 12 | 0.21 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 6 | 0.21 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 6 | 0.21 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 6 | 0.21 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 6 | 0.21 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 6 | 0.21 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 6 | 0.21 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 6 | 0.21 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 6 | 0.21 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 6 | 0.21 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD11 | 3 | 0.21 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD12 | 3 | 0.21 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD13 | 3 | 0.21 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD11 | 20 | 0.21 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD12 | 20 | 0.21 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD13 | 20 | 0.21 |
| (1,2352) | 1:A:96:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 8 | 0.21 |
| (1,2352) | 1:A:96:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 8 | 0.21 |
| (1,2352) | 1:A:96:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 8 | 0.21 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 0.21 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 0.21 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 0.21 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 0.21 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 0.21 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 0.21 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 0.21 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 0.21 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 0.21 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG11 | 3 | 0.21 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG12 | 3 | 0.21 |
| (1,2070) | 1:A:15:GLU:HB2 | 1:A:16:VAL:HG13 | 3 | 0.21 |
| (1,2030) | 1:A:159:GLN:HA | 1:A:159:GLN:HG3 | 2 | 0.21 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 9 | 0.21 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 9 | 0.21 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 9 | 0.21 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG11 | 17 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG12 | 17 | 0.21 |
| (1,1993) | 1:A:153:THR:HA | 1:A:175:VAL:HG13 | 17 | 0.21 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 1 | 0.21 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 1 | 0.21 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 1 | 0.21 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 2 | 0.21 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 2 | 0.21 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 2 | 0.21 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:173:GLY:HA2 | 6 | 0.21 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:173:GLY:HA2 | 6 | 0.21 |
| (1,1844) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:173:GLY:HA2 | 6 | 0.21 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG21 | 1 | 0.21 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG22 | 1 | 0.21 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG23 | 1 | 0.21 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:HB2 | 14 | 0.21 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:HB2 | 14 | 0.21 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:HB2 | 14 | 0.21 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:24:ASP:H | 15 | 0.21 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:24:ASP:H | 15 | 0.21 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:24:ASP:H | 15 | 0.21 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 14 | 0.21 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 14 | 0.21 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 14 | 0.21 |
| (1,158) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:113:LEU:H | 19 | 0.21 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:H | 7 | 0.21 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:H | 7 | 0.21 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:H | 7 | 0.21 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 17 | 0.21 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 17 | 0.21 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 17 | 0.21 |
| (1,1393) | 1:A:48:THR:HA | 1:A:138:PHE:HB3 | 2 | 0.21 |
| (1,1393) | 1:A:48:THR:HA | 1:A:138:PHE:HB3 | 17 | 0.21 |
| (1,1383) | 1:A:103:ILE:HA | 1:A:104:LEU:HD21 | 12 | 0.21 |
| (1,1383) | 1:A:103:ILE:HA | 1:A:104:LEU:HD22 | 12 | 0.21 |
| (1,1383) | 1:A:103:ILE:HA | 1:A:104:LEU:HD23 | 12 | 0.21 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 8 | 0.21 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 8 | 0.21 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 8 | 0.21 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 8 | 0.21 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 8 | 0.21 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 8 | 0.21 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 8 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 8 | 0.21 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 8 | 0.21 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 6 | 0.21 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 6 | 0.21 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 6 | 0.21 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 15 | 0.21 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 15 | 0.21 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 15 | 0.21 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 15 | 0.21 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 15 | 0.21 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 15 | 0.21 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 15 | 0.21 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 15 | 0.21 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 15 | 0.21 |
| (1,1075) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:H | 15 | 0.21 |
| (1,1019) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:138:PHE:HB2 | 8 | 0.21 |
| (1,1019) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:138:PHE:HB2 | 11 | 0.21 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 11 | 0.2 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 9 | 0.2 |
| (1,762) | 1:A:90:SER:HB3 | 1:A:91:SER:H | 8 | 0.2 |
| (1,686) | 1:A:115:GLY:HA3 | 1:A:117:THR:H | 17 | 0.2 |
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 20 | 0.2 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG21 | 11 | 0.2 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG22 | 11 | 0.2 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG23 | 11 | 0.2 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:33:GLN:HB3 | 20 | 0.2 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:33:GLN:HB3 | 20 | 0.2 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:33:GLN:HB3 | 20 | 0.2 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 18 | 0.2 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 18 | 0.2 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 18 | 0.2 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 18 | 0.2 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 18 | 0.2 |
| (1,3611) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 18 | 0.2 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 10 | 0.2 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 10 | 0.2 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 10 | 0.2 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 10 | 0.2 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 10 | 0.2 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 10 | 0.2 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 12 | 0.2 |
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 12 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3553) | 1:A:38:ARG:HG2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 12 | 0.2 |
| (1,3540) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 2 | 0.2 |
| (1,3516) | 1:A:107:THR:HG21 | 1:A:120:SER:HB3 | 12 | 0.2 |
| (1,3516) | 1:A:107:THR:HG22 | 1:A:120:SER:HB3 | 12 | 0.2 |
| (1,3516) | 1:A:107:THR:HG23 | 1:A:120:SER:HB3 | 12 | 0.2 |
| (1,3486) | 1:A:78:ILE:HG12 | 1:A:79:ASP:HB3 | 3 | 0.2 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB1 | 7 | 0.2 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB2 | 7 | 0.2 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB3 | 7 | 0.2 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG2 | 11 | 0.2 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG3 | 11 | 0.2 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB3 | 2 | 0.2 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB3 | 2 | 0.2 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB3 | 2 | 0.2 |
| (1,3137) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 3 | 0.2 |
| (1,3137) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 9 | 0.2 |
| (1,3137) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 12 | 0.2 |
| (1,3137) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 14 | 0.2 |
| (1,3137) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 18 | 0.2 |
| (1,2804) | 1:A:102:GLN:HG2 | 1:A:138:PHE:HB3 | 7 | 0.2 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 17 | 0.2 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 20 | 0.2 |
| (1,2677) | 1:A:28:VAL:HB | 1:A:173:GLY:HA2 | 15 | 0.2 |
| (1,2618) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:124:LEU:HD11 | 9 | 0.2 |
| (1,2618) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:124:LEU:HD12 | 9 | 0.2 |
| (1,2618) | 1:A:69:ALA:HA | 1:A:124:LEU:HD13 | 9 | 0.2 |
| (1,2414) | 1:A:36:GLN:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 14 | 0.2 |
| (1,2414) | 1:A:36:GLN:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 14 | 0.2 |
| (1,2414) | 1:A:36:GLN:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 14 | 0.2 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 1 | 0.2 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 1 | 0.2 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 1 | 0.2 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB1 | 1:A:149:ASN:HD21 | 17 | 0.2 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB2 | 1:A:149:ASN:HD21 | 17 | 0.2 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB3 | 1:A:149:ASN:HD21 | 17 | 0.2 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 0.2 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 0.2 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 0.2 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 0.2 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 0.2 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 0.2 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 0.2 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 0.2 |
| (1,2090) | 1:A:16:VAL:HG11 | 1:A:170:VAL:HB | 6 | 0.2 |
| (1,2090) | 1:A:16:VAL:HG12 | 1:A:170:VAL:HB | 6 | 0.2 |
| (1,2090) | 1:A:16:VAL:HG13 | 1:A:170:VAL:HB | 6 | 0.2 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 3 | 0.2 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 3 | 0.2 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 3 | 0.2 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 6 | 0.2 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 6 | 0.2 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 6 | 0.2 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 15 | 0.2 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 15 | 0.2 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 15 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG21 | 4 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG22 | 4 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG23 | 4 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG21 | 4 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG22 | 4 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG23 | 4 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG21 | 4 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG22 | 4 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG23 | 4 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG21 | 10 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG22 | 10 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG23 | 10 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG21 | 10 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG22 | 10 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG23 | 10 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG21 | 10 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG22 | 10 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG23 | 10 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG21 | 11 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG22 | 11 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG23 | 11 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG21 | 11 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG22 | 11 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG23 | 11 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG21 | 11 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG22 | 11 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG23 | 11 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG21 | 15 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG22 | 15 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG23 | 15 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG21 | 15 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG22 | 15 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG23 | 15 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG21 | 15 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG22 | 15 | 0.2 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG23 | 15 | 0.2 |
| (1,1697) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:72:ALA:HA | 19 | 0.2 |
| (1,1697) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:72:ALA:HA | 19 | 0.2 |
| (1,1697) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:72:ALA:HA | 19 | 0.2 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:H | 13 | 0.2 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:H | 13 | 0.2 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:H | 13 | 0.2 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD11 | 14 | 0.2 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD12 | 14 | 0.2 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD13 | 14 | 0.2 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD21 | 14 | 0.2 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD22 | 14 | 0.2 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:113:LEU:HD23 | 14 | 0.2 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD11 | 14 | 0.2 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD12 | 14 | 0.2 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD13 | 14 | 0.2 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD21 | 14 | 0.2 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD22 | 14 | 0.2 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:113:LEU:HD23 | 14 | 0.2 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD11 | 14 | 0.2 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD12 | 14 | 0.2 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD13 | 14 | 0.2 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD21 | 14 | 0.2 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD22 | 14 | 0.2 |
| (1,1636) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:113:LEU:HD23 | 14 | 0.2 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 11 | 0.2 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 11 | 0.2 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 11 | 0.2 |
| (1,1609) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:124:LEU:HD11 | 13 | 0.2 |
| (1,1609) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:124:LEU:HD12 | 13 | 0.2 |
| (1,1609) | 1:A:61:CYS:HA | 1:A:124:LEU:HD13 | 13 | 0.2 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB1 | 4 | 0.2 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB2 | 4 | 0.2 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB3 | 4 | 0.2 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB1 | 4 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB2 | 4 | 0.2 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB3 | 4 | 0.2 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB1 | 4 | 0.2 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB2 | 4 | 0.2 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB3 | 4 | 0.2 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 0.2 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 0.2 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 0.2 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 0.2 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 0.2 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 0.2 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 0.2 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 0.2 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 0.2 |
| (1,1526) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 4 | 0.2 |
| (1,1526) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 4 | 0.2 |
| (1,1526) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 4 | 0.2 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG21 | 7 | 0.2 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG22 | 7 | 0.2 |
| (1,151) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG23 | 7 | 0.2 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HA | 14 | 0.2 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HA | 14 | 0.2 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HA | 14 | 0.2 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:H | 5 | 0.2 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:H | 5 | 0.2 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:H | 5 | 0.2 |
| (1,1393) | 1:A:48:THR:HA | 1:A:138:PHE:HB3 | 7 | 0.2 |
| (1,1393) | 1:A:48:THR:HA | 1:A:138:PHE:HB3 | 8 | 0.2 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD3 | 4 | 0.2 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD3 | 4 | 0.2 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD3 | 4 | 0.2 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD2 | 4 | 0.2 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD2 | 4 | 0.2 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD2 | 4 | 0.2 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 9 | 0.2 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 9 | 0.2 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 9 | 0.2 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 9 | 0.2 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 9 | 0.2 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 9 | 0.2 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 9 | 0.2 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 9 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 9 | 0.2 |
| (1,1215) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 17 | 0.2 |
| (1,1215) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 17 | 0.2 |
| (1,1215) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 17 | 0.2 |
| (1,764) | 1:A:91:SER:H | 1:A:91:SER:HB3 | 15 | 0.19 |
| (1,750) | 1:A:133:PHE:HB2 | 1:A:134:GLN:H | 5 | 0.19 |
| (1,750) | 1:A:133:PHE:HB2 | 1:A:134:GLN:H | 9 | 0.19 |
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 15 | 0.19 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 15 | 0.19 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 15 | 0.19 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 15 | 0.19 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 15 | 0.19 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 15 | 0.19 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 15 | 0.19 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG21 | 8 | 0.19 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG22 | 8 | 0.19 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG23 | 8 | 0.19 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG21 | 16 | 0.19 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG22 | 16 | 0.19 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG23 | 16 | 0.19 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 5 | 0.19 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 5 | 0.19 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:H | 1 | 0.19 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:H | 1 | 0.19 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:H | 1 | 0.19 |
| (1,374) | 1:A:12:PHE:H | 1:A:12:PHE:HB3 | 14 | 0.19 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:33:GLN:HB3 | 17 | 0.19 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:33:GLN:HB3 | 17 | 0.19 |
| (1,3636) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:33:GLN:HB3 | 17 | 0.19 |
| (1,3486) | 1:A:78:ILE:HG12 | 1:A:79:ASP:HB3 | 4 | 0.19 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB1 | 13 | 0.19 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB2 | 13 | 0.19 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB3 | 13 | 0.19 |
| (1,3261) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HB | 12 | 0.19 |
| (1,3238) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:176:HIS:H | 10 | 0.19 |
| (1,3137) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 5 | 0.19 |
| (1,3137) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 7 | 0.19 |
| (1,3137) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 17 | 0.19 |
| (1,3137) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 19 | 0.19 |
| (1,3137) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 20 | 0.19 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD11 | 14 | 0.19 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD12 | 14 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD13 | 14 | 0.19 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD11 | 19 | 0.19 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD12 | 19 | 0.19 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD13 | 19 | 0.19 |
| (1,3) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:176:HIS:HB3 | 11 | 0.19 |
| (1,2981) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:183:ASN:HB3 | 5 | 0.19 |
| (1,2858) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:29:ASP:HB3 | 7 | 0.19 |
| (1,2857) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:111:LEU:HG | 7 | 0.19 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 12 | 0.19 |
| (1,2743) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:75:GLY:HA3 | 2 | 0.19 |
| (1,2726) | 1:A:8:GLY:HA2 | 1:A:9:THR:H | 7 | 0.19 |
| (1,2726) | 1:A:8:GLY:HA2 | 1:A:9:THR:H | 18 | 0.19 |
| (1,2677) | 1:A:28:VAL:HB | 1:A:173:GLY:HA2 | 13 | 0.19 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD11 | 5 | 0.19 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD12 | 5 | 0.19 |
| (1,254) | 1:A:103:ILE:H | 1:A:104:LEU:HD13 | 5 | 0.19 |
| (1,2317) | 1:A:44:GLN:HA | 1:A:141:GLY:HA3 | 17 | 0.19 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB1 | 14 | 0.19 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB2 | 14 | 0.19 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB3 | 14 | 0.19 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB1 | 14 | 0.19 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB2 | 14 | 0.19 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB3 | 14 | 0.19 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB1 | 14 | 0.19 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB2 | 14 | 0.19 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB3 | 14 | 0.19 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 15 | 0.19 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 15 | 0.19 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 15 | 0.19 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 20 | 0.19 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 20 | 0.19 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 20 | 0.19 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 5 | 0.19 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 5 | 0.19 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 5 | 0.19 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE21 | 2 | 0.19 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE21 | 2 | 0.19 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE21 | 2 | 0.19 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE22 | 2 | 0.19 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE22 | 2 | 0.19 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE22 | 2 | 0.19 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 12 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 12 | 0.19 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 12 | 0.19 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG21 | 15 | 0.19 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG22 | 15 | 0.19 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG23 | 15 | 0.19 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:HB2 | 3 | 0.19 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:HB2 | 3 | 0.19 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:HB2 | 3 | 0.19 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:HB2 | 9 | 0.19 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:HB2 | 9 | 0.19 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:HB2 | 9 | 0.19 |
| (1,1763) | 1:A:152:ALA:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 10 | 0.19 |
| (1,1763) | 1:A:152:ALA:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 10 | 0.19 |
| (1,1763) | 1:A:152:ALA:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 10 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:48:THR:HG21 | 1:A:136:ARG:HD3 | 14 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:48:THR:HG22 | 1:A:136:ARG:HD3 | 14 | 0.19 |
| (1,1742) | 1:A:48:THR:HG23 | 1:A:136:ARG:HD3 | 14 | 0.19 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:24:ASP:H | 11 | 0.19 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:24:ASP:H | 11 | 0.19 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:24:ASP:H | 11 | 0.19 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG11 | 4 | 0.19 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG12 | 4 | 0.19 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG13 | 4 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:120:SER:H | 10 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:120:SER:H | 10 | 0.19 |
| (1,1595) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:120:SER:H | 10 | 0.19 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:H | 17 | 0.19 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:H | 17 | 0.19 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:H | 17 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:48:THR:HA | 1:A:138:PHE:HB3 | 13 | 0.19 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:135:ALA:HA | 18 | 0.19 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:135:ALA:HA | 18 | 0.19 |
| (1,1379) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:135:ALA:HA | 18 | 0.19 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:H | 5 | 0.19 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:H | 5 | 0.19 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:H | 5 | 0.19 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 18 | 0.19 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 18 | 0.19 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 18 | 0.19 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 18 | 0.19 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 18 | 0.19 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 18 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 18 | 0.19 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 18 | 0.19 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 18 | 0.19 |
| (1,1301) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:120:SER:HA | 7 | 0.19 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:177:PHE:HA | 14 | 0.19 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:177:PHE:HA | 14 | 0.19 |
| (1,1269) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:177:PHE:HA | 14 | 0.19 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:153:THR:H | 17 | 0.19 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:153:THR:H | 17 | 0.19 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:153:THR:H | 17 | 0.19 |
| (1,1019) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:138:PHE:HB2 | 15 | 0.19 |
| (1,915) | 1:A:125:ASN:HB2 | 1:A:125:ASN:HD21 | 9 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:125:ASN:HB2 | 1:A:125:ASN:HD21 | 18 | 0.18 |
| (1,902) | 1:A:55:ASN:H | 1:A:55:ASN:HD21 | 3 | 0.18 |
| (1,764) | 1:A:91:SER:H | 1:A:91:SER:HB3 | 12 | 0.18 |
| (1,56) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:131:ILE:H | 7 | 0.18 |
| (1,503) | 1:A:125:ASN:HB3 | 1:A:126:ASN:H | 10 | 0.18 |
| (1,494) | 1:A:14:GLY:HA2 | 1:A:15:GLU:H | 13 | 0.18 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE1 | 7 | 0.18 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE2 | 7 | 0.18 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 12 | 0.18 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 12 | 0.18 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 12 | 0.18 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 12 | 0.18 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 12 | 0.18 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 12 | 0.18 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 13 | 0.18 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 13 | 0.18 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 13 | 0.18 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 13 | 0.18 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 13 | 0.18 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 13 | 0.18 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 3 | 0.18 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 3 | 0.18 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 3 | 0.18 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 3 | 0.18 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 3 | 0.18 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 3 | 0.18 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:H | 6 | 0.18 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:H | 6 | 0.18 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:H | 6 | 0.18 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG13 | 13 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG13 | 13 | 0.18 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG13 | 13 | 0.18 |
| (1,365) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:138:PHE:H | 13 | 0.18 |
| (1,365) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:138:PHE:H | 14 | 0.18 |
| (1,3540) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 15 | 0.18 |
| (1,3540) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 19 | 0.18 |
| (1,3380) | 1:A:88:LEU:HG | 1:A:95:SER:HB2 | 17 | 0.18 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB1 | 1 | 0.18 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB2 | 1 | 0.18 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB3 | 1 | 0.18 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB1 | 10 | 0.18 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB2 | 10 | 0.18 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB3 | 10 | 0.18 |
| (1,3137) | 1:A:45:GLU:HG3 | 1:A:47:ALA:H | 10 | 0.18 |
| (1,3058) | 1:A:121:GLU:HG2 | 1:A:122:THR:H | 17 | 0.18 |
| (1,2923) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:62:ASP:H | 7 | 0.18 |
| (1,2923) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:62:ASP:H | 19 | 0.18 |
| (1,2912) | 1:A:62:ASP:HB2 | 1:A:65:VAL:H | 5 | 0.18 |
| (1,2726) | 1:A:8:GLY:HA2 | 1:A:9:THR:H | 10 | 0.18 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 3 | 0.18 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 3 | 0.18 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 3 | 0.18 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 3 | 0.18 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 3 | 0.18 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 3 | 0.18 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 3 | 0.18 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 3 | 0.18 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 3 | 0.18 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG11 | 17 | 0.18 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG12 | 17 | 0.18 |
| (1,2510) | 1:A:19:ALA:HA | 1:A:65:VAL:HG13 | 17 | 0.18 |
| (1,2398) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:110:ALA:HB1 | 7 | 0.18 |
| (1,2398) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:110:ALA:HB2 | 7 | 0.18 |
| (1,2398) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:110:ALA:HB3 | 7 | 0.18 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 1 | 0.18 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 1 | 0.18 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 1 | 0.18 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 10 | 0.18 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 10 | 0.18 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 10 | 0.18 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 16 | 0.18 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 16 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 16 | 0.18 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 16 | 0.18 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 16 | 0.18 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 16 | 0.18 |
| (1,1974) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:124:LEU:HD21 | 13 | 0.18 |
| (1,1974) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:124:LEU:HD22 | 13 | 0.18 |
| (1,1974) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:124:LEU:HD23 | 13 | 0.18 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 18 | 0.18 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 18 | 0.18 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 18 | 0.18 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 3 | 0.18 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 3 | 0.18 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 3 | 0.18 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:H | 14 | 0.18 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:H | 14 | 0.18 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:H | 14 | 0.18 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:HB2 | 11 | 0.18 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:HB2 | 11 | 0.18 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:HB2 | 11 | 0.18 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:HB2 | 17 | 0.18 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:HB2 | 17 | 0.18 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:HB2 | 17 | 0.18 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:HB2 | 20 | 0.18 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:HB2 | 20 | 0.18 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:HB2 | 20 | 0.18 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 7 | 0.18 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 7 | 0.18 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 7 | 0.18 |
| (1,1763) | 1:A:152:ALA:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 7 | 0.18 |
| (1,1763) | 1:A:152:ALA:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 7 | 0.18 |
| (1,1763) | 1:A:152:ALA:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 7 | 0.18 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:138:PHE:H | 1 | 0.18 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:H | 1 | 0.18 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:138:PHE:H | 1 | 0.18 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:28:VAL:H | 18 | 0.18 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:28:VAL:H | 18 | 0.18 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:28:VAL:H | 18 | 0.18 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB1 | 14 | 0.18 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB2 | 14 | 0.18 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB3 | 14 | 0.18 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB1 | 14 | 0.18 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB2 | 14 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB3 | 14 | 0.18 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB1 | 14 | 0.18 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB2 | 14 | 0.18 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB3 | 14 | 0.18 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:H | 12 | 0.18 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:H | 12 | 0.18 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:H | 12 | 0.18 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG21 | 13 | 0.18 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG22 | 13 | 0.18 |
| (1,1627) | 1:A:155:LYS:HE2 | 1:A:169:THR:HG23 | 13 | 0.18 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 0.18 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 0.18 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 0.18 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 0.18 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 0.18 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 0.18 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 0.18 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 0.18 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 0.18 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 0.18 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 0.18 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 0.18 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 0.18 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 0.18 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 0.18 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 0.18 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 0.18 |
| (1,1557) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 0.18 |
| (1,1528) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD21 | 12 | 0.18 |
| (1,1528) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD22 | 12 | 0.18 |
| (1,1528) | 1:A:74:LEU:H | 1:A:74:LEU:HD23 | 12 | 0.18 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HA | 13 | 0.18 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HA | 13 | 0.18 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HA | 13 | 0.18 |
| (1,1393) | 1:A:48:THR:HA | 1:A:138:PHE:HB3 | 19 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 15 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 15 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 15 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 15 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 15 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 15 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 15 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 15 | 0.18 |
| (1,1371) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 15 | 0.18 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB1 | 19 | 0.18 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB2 | 19 | 0.18 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:150:ALA:HB3 | 19 | 0.18 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB1 | 19 | 0.18 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB2 | 19 | 0.18 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:150:ALA:HB3 | 19 | 0.18 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB1 | 19 | 0.18 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB2 | 19 | 0.18 |
| (1,1335) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:150:ALA:HB3 | 19 | 0.18 |
| (1,1316) | 1:A:27:SER:HA | 1:A:30:GLN:HG3 | 7 | 0.18 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 18 | 0.18 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 18 | 0.18 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 18 | 0.18 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD21 | 1 | 0.18 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD22 | 1 | 0.18 |
| (1,1270) | 1:A:33:GLN:HA | 1:A:34:LEU:HD23 | 1 | 0.18 |
| (1,1238) | 1:A:35:GLY:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 14 | 0.18 |
| (1,1238) | 1:A:35:GLY:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 14 | 0.18 |
| (1,1238) | 1:A:35:GLY:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 14 | 0.18 |
| (1,1080) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:GLY:HA3 | 15 | 0.18 |
| (1,942) | 1:A:24:ASP:HB2 | 1:A:27:SER:H | 7 | 0.17 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,796) | 1:A:38:ARG:HB2 | 1:A:39:THR:H | 1 | 0.17 |
| (1,750) | 1:A:133:PHE:HB2 | 1:A:134:GLN:H | 14 | 0.17 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG21 | 14 | 0.17 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG22 | 14 | 0.17 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG23 | 14 | 0.17 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG21 | 19 | 0.17 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG22 | 19 | 0.17 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG23 | 19 | 0.17 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:172:GLY:HA2 | 10 | 0.17 |
| (1,3864) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:172:GLY:HA2 | 10 | 0.17 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 3 | 0.17 |
| (1,3564) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HA | 3 | 0.17 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB1 | 11 | 0.17 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB2 | 11 | 0.17 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB3 | 11 | 0.17 |
| (1,2987) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:66:ALA:H | 7 | 0.17 |
| (1,293) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:65:VAL:HG11 | 7 | 0.17 |
| (1,293) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:65:VAL:HG12 | 7 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,293) | 1:A:19:ALA:H | 1:A:65:VAL:HG13 | 7 | 0.17 |
| (1,2899) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:121:GLU:HG2 | 10 | 0.17 |
| (1,2899) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:121:GLU:HG2 | 10 | 0.17 |
| (1,2864) | 1:A:89:GLN:HE21 | 1:A:178:LYS:HE3 | 6 | 0.17 |
| (1,2701) | 1:A:159:GLN:HA | 1:A:160:GLY:HA3 | 7 | 0.17 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG11 | 11 | 0.17 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG12 | 11 | 0.17 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:71:VAL:HG13 | 11 | 0.17 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG11 | 11 | 0.17 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG12 | 11 | 0.17 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:71:VAL:HG13 | 11 | 0.17 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG11 | 11 | 0.17 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG12 | 11 | 0.17 |
| (1,2692) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:71:VAL:HG13 | 11 | 0.17 |
| (1,2677) | 1:A:28:VAL:HB | 1:A:173:GLY:HA2 | 19 | 0.17 |
| (1,2327) | 1:A:170:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 9 | 0.17 |
| (1,2327) | 1:A:170:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 9 | 0.17 |
| (1,2327) | 1:A:170:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 9 | 0.17 |
| (1,2317) | 1:A:44:GLN:HA | 1:A:141:GLY:HA3 | 2 | 0.17 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 5 | 0.17 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 5 | 0.17 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 5 | 0.17 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 20 | 0.17 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 20 | 0.17 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 20 | 0.17 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG11 | 14 | 0.17 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG12 | 14 | 0.17 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG13 | 14 | 0.17 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG21 | 14 | 0.17 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG22 | 14 | 0.17 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG23 | 14 | 0.17 |
| (1,2030) | 1:A:159:GLN:HA | 1:A:159:GLN:HG3 | 16 | 0.17 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:HB2 | 4 | 0.17 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:HB2 | 4 | 0.17 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:HB2 | 4 | 0.17 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:HB2 | 13 | 0.17 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:HB2 | 13 | 0.17 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:HB2 | 13 | 0.17 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG21 | 14 | 0.17 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG22 | 14 | 0.17 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:175:VAL:HG23 | 14 | 0.17 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG21 | 14 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG22 | 14 | 0.17 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:175:VAL:HG23 | 14 | 0.17 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG21 | 14 | 0.17 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG22 | 14 | 0.17 |
| (1,1773) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:175:VAL:HG23 | 14 | 0.17 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG21 | 1:A:138:PHE:H | 5 | 0.17 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG22 | 1:A:138:PHE:H | 5 | 0.17 |
| (1,1714) | 1:A:85:VAL:HG23 | 1:A:138:PHE:H | 5 | 0.17 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:28:VAL:H | 12 | 0.17 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:28:VAL:H | 12 | 0.17 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:28:VAL:H | 12 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG11 | 18 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG12 | 18 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG13 | 18 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG11 | 18 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG12 | 18 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG13 | 18 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG11 | 18 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG12 | 18 | 0.17 |
| (1,1657) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG13 | 18 | 0.17 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:74:LEU:HD21 | 9 | 0.17 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:74:LEU:HD22 | 9 | 0.17 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:74:LEU:HD23 | 9 | 0.17 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:74:LEU:HD21 | 9 | 0.17 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:74:LEU:HD22 | 9 | 0.17 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:74:LEU:HD23 | 9 | 0.17 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 9 | 0.17 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 9 | 0.17 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 9 | 0.17 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 18 | 0.17 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 18 | 0.17 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 18 | 0.17 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 18 | 0.17 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 18 | 0.17 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 18 | 0.17 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 18 | 0.17 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 18 | 0.17 |
| (1,1524) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 18 | 0.17 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:34:LEU:HD11 | 12 | 0.17 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:34:LEU:HD12 | 12 | 0.17 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:34:LEU:HD13 | 12 | 0.17 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:34:LEU:HD11 | 12 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:34:LEU:HD12 | 12 | 0.17 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:34:LEU:HD13 | 12 | 0.17 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:34:LEU:HD11 | 12 | 0.17 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:34:LEU:HD12 | 12 | 0.17 |
| (1,1482) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:34:LEU:HD13 | 12 | 0.17 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:H | 11 | 0.17 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:H | 11 | 0.17 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:H | 11 | 0.17 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:145:PRO:HG2 | 8 | 0.17 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:145:PRO:HG2 | 8 | 0.17 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:145:PRO:HG2 | 8 | 0.17 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HE22 | 18 | 0.17 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HE22 | 18 | 0.17 |
| (1,1378) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HE22 | 18 | 0.17 |
| (1,1094) | 1:A:157:GLN:HB2 | 1:A:159:GLN:HE21 | 15 | 0.17 |
| (1,1075) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:H | 2 | 0.17 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:153:THR:H | 18 | 0.17 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:153:THR:H | 18 | 0.17 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:153:THR:H | 18 | 0.17 |
| (1,942) | 1:A:24:ASP:HB2 | 1:A:27:SER:H | 19 | 0.16 |
| (1,86) | 1:A:33:GLN:H | 1:A:33:GLN:HB3 | 14 | 0.16 |
| (1,844) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:64:ASN:HD22 | 6 | 0.16 |
| (1,764) | 1:A:91:SER:H | 1:A:91:SER:HB3 | 20 | 0.16 |
| (1,762) | 1:A:90:SER:HB3 | 1:A:91:SER:H | 19 | 0.16 |
| (1,75) | 1:A:72:ALA:H | 1:A:155:LYS:HB3 | 11 | 0.16 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 20 | 0.16 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 20 | 0.16 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 20 | 0.16 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 7 | 0.16 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 7 | 0.16 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 7 | 0.16 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 7 | 0.16 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 7 | 0.16 |
| (1,3998) | 1:A:156:VAL:HG23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 7 | 0.16 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE1 | 8 | 0.16 |
| (1,3910) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:133:PHE:HE2 | 8 | 0.16 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:H | 2 | 0.16 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:H | 2 | 0.16 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:H | 2 | 0.16 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:H | 14 | 0.16 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:H | 14 | 0.16 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:H | 14 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:H | 19 | 0.16 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:H | 19 | 0.16 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:H | 19 | 0.16 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 0.16 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 0.16 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 0.16 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 0.16 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 0.16 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 0.16 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 18 | 0.16 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 18 | 0.16 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 18 | 0.16 |
| (1,3671) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:32:VAL:HA | 17 | 0.16 |
| (1,365) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:138:PHE:H | 7 | 0.16 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 12 | 0.16 |
| (1,3524) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:120:SER:HB2 | 20 | 0.16 |
| (1,3524) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:120:SER:HB2 | 20 | 0.16 |
| (1,3524) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:120:SER:HB2 | 20 | 0.16 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 1 | 0.16 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:27:SER:HB2 | 5 | 0.16 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:27:SER:HB2 | 5 | 0.16 |
| (1,3342) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:27:SER:HB2 | 5 | 0.16 |
| (1,3325) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:119:SER:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,3323) | 1:A:119:SER:HB3 | 1:A:120:SER:HB2 | 3 | 0.16 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG2 | 9 | 0.16 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG3 | 9 | 0.16 |
| (1,3197) | 1:A:99:VAL:HB | 1:A:181:VAL:HG11 | 17 | 0.16 |
| (1,3197) | 1:A:99:VAL:HB | 1:A:181:VAL:HG12 | 17 | 0.16 |
| (1,3197) | 1:A:99:VAL:HB | 1:A:181:VAL:HG13 | 17 | 0.16 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HB | 4 | 0.16 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HB | 4 | 0.16 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HB | 4 | 0.16 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HB | 6 | 0.16 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HB | 6 | 0.16 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HB | 6 | 0.16 |
| (1,3002) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:113:LEU:HD11 | 13 | 0.16 |
| (1,3002) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:113:LEU:HD12 | 13 | 0.16 |
| (1,3002) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:113:LEU:HD13 | 13 | 0.16 |
| (1,3002) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:113:LEU:HD21 | 13 | 0.16 |
| (1,3002) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:113:LEU:HD22 | 13 | 0.16 |
| (1,3002) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:113:LEU:HD23 | 13 | 0.16 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:183:ASN:HB3 | 14 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:183:ASN:HB3 | 14 | 0.16 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:183:ASN:HB3 | 14 | 0.16 |
| (1,2756) | 1:A:132:PRO:HA | 1:A:133:PHE:HB3 | 9 | 0.16 |
| (1,2704) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:160:GLY:HA2 | 18 | 0.16 |
| (1,2704) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:160:GLY:HA2 | 18 | 0.16 |
| (1,2704) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:160:GLY:HA2 | 18 | 0.16 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HD11 | 9 | 0.16 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HD12 | 9 | 0.16 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HD13 | 9 | 0.16 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HD11 | 9 | 0.16 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HD12 | 9 | 0.16 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HD13 | 9 | 0.16 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HD11 | 9 | 0.16 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HD12 | 9 | 0.16 |
| (1,2649) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HD13 | 9 | 0.16 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG21 | 4 | 0.16 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG22 | 4 | 0.16 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG23 | 4 | 0.16 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG21 | 4 | 0.16 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG22 | 4 | 0.16 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG23 | 4 | 0.16 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG21 | 4 | 0.16 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG22 | 4 | 0.16 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG23 | 4 | 0.16 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG21 | 17 | 0.16 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG22 | 17 | 0.16 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG23 | 17 | 0.16 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG21 | 17 | 0.16 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG22 | 17 | 0.16 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG23 | 17 | 0.16 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG21 | 17 | 0.16 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG22 | 17 | 0.16 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG23 | 17 | 0.16 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:171:ASN:HA | 2 | 0.16 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:171:ASN:HA | 2 | 0.16 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:171:ASN:HA | 2 | 0.16 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:171:ASN:HA | 19 | 0.16 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:171:ASN:HA | 19 | 0.16 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:171:ASN:HA | 19 | 0.16 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB1 | 1:A:149:ASN:HD21 | 7 | 0.16 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB2 | 1:A:149:ASN:HD21 | 7 | 0.16 |
| (1,2324) | 1:A:147:ALA:HB3 | 1:A:149:ASN:HD21 | 7 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2317) | 1:A:44:GLN:HA | 1:A:141:GLY:HA3 | 6 | 0.16 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 19 | 0.16 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 19 | 0.16 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 19 | 0.16 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB1 | 8 | 0.16 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB2 | 8 | 0.16 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:43:ALA:HB3 | 8 | 0.16 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB1 | 8 | 0.16 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB2 | 8 | 0.16 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:43:ALA:HB3 | 8 | 0.16 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB1 | 8 | 0.16 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB2 | 8 | 0.16 |
| (1,2238) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:43:ALA:HB3 | 8 | 0.16 |
| (1,2211) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:136:ARG:HD2 | 16 | 0.16 |
| (1,2211) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:136:ARG:HD2 | 16 | 0.16 |
| (1,2211) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:136:ARG:HD2 | 16 | 0.16 |
| (1,2196) | 1:A:52:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 11 | 0.16 |
| (1,2196) | 1:A:52:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 11 | 0.16 |
| (1,2196) | 1:A:52:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 11 | 0.16 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 12 | 0.16 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 12 | 0.16 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 12 | 0.16 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG11 | 7 | 0.16 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG12 | 7 | 0.16 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG13 | 7 | 0.16 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG21 | 7 | 0.16 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG22 | 7 | 0.16 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG23 | 7 | 0.16 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG11 | 19 | 0.16 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG12 | 19 | 0.16 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG13 | 19 | 0.16 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG21 | 19 | 0.16 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG22 | 19 | 0.16 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG23 | 19 | 0.16 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG11 | 19 | 0.16 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG12 | 19 | 0.16 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG13 | 19 | 0.16 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG21 | 19 | 0.16 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG22 | 19 | 0.16 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG23 | 19 | 0.16 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 0.16 |
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,210) | 1:A:22:ALA:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 0.16 |
| (1,2030) | 1:A:159:GLN:HA | 1:A:159:GLN:HG3 | 6 | 0.16 |
| (1,2030) | 1:A:159:GLN:HA | 1:A:159:GLN:HG3 | 9 | 0.16 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 8 | 0.16 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 8 | 0.16 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 8 | 0.16 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 14 | 0.16 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 14 | 0.16 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 14 | 0.16 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 15 | 0.16 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 15 | 0.16 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 15 | 0.16 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG21 | 5 | 0.16 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG22 | 5 | 0.16 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG23 | 5 | 0.16 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG21 | 6 | 0.16 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG22 | 6 | 0.16 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG23 | 6 | 0.16 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 8 | 0.16 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 8 | 0.16 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 8 | 0.16 |
| (1,193) | 1:A:13:LYS:H | 1:A:13:LYS:HB3 | 8 | 0.16 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 13 | 0.16 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 13 | 0.16 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 13 | 0.16 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:174:THR:H | 13 | 0.16 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:174:THR:H | 13 | 0.16 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:174:THR:H | 13 | 0.16 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:H | 2 | 0.16 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:H | 2 | 0.16 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:H | 2 | 0.16 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:HB2 | 18 | 0.16 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:HB2 | 18 | 0.16 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:HB2 | 18 | 0.16 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:H | 9 | 0.16 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:H | 9 | 0.16 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:H | 9 | 0.16 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG11 | 17 | 0.16 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG12 | 17 | 0.16 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG13 | 17 | 0.16 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 6 | 0.16 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 6 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 6 | 0.16 |
| (1,1526) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 16 | 0.16 |
| (1,1526) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 16 | 0.16 |
| (1,1526) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 16 | 0.16 |
| (1,1393) | 1:A:48:THR:HA | 1:A:138:PHE:HB3 | 16 | 0.16 |
| (1,1238) | 1:A:35:GLY:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 10 | 0.16 |
| (1,1238) | 1:A:35:GLY:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 10 | 0.16 |
| (1,1238) | 1:A:35:GLY:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 10 | 0.16 |
| (1,1106) | 1:A:74:LEU:HB3 | 1:A:115:GLY:H | 17 | 0.16 |
| (1,927) | 1:A:79:ASP:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 10 | 0.15 |
| (1,927) | 1:A:79:ASP:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 10 | 0.15 |
| (1,927) | 1:A:79:ASP:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 10 | 0.15 |
| (1,857) | 1:A:49:SER:H | 1:A:136:ARG:HD3 | 17 | 0.15 |
| (1,797) | 1:A:38:ARG:HG3 | 1:A:39:THR:H | 20 | 0.15 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:57:GLN:H | 18 | 0.15 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:57:GLN:H | 18 | 0.15 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:57:GLN:H | 18 | 0.15 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE1 | 13 | 0.15 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE2 | 13 | 0.15 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE1 | 13 | 0.15 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE2 | 13 | 0.15 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE1 | 13 | 0.15 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE2 | 13 | 0.15 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 13 | 0.15 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 13 | 0.15 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 13 | 0.15 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 13 | 0.15 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 13 | 0.15 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 13 | 0.15 |
| (1,3981) | 1:A:37:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE1 | 9 | 0.15 |
| (1,3981) | 1:A:37:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE2 | 9 | 0.15 |
| (1,3981) | 1:A:37:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE1 | 9 | 0.15 |
| (1,3981) | 1:A:37:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE2 | 9 | 0.15 |
| (1,3981) | 1:A:37:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE1 | 9 | 0.15 |
| (1,3981) | 1:A:37:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE2 | 9 | 0.15 |
| (1,3981) | 1:A:37:VAL:HG21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 9 | 0.15 |
| (1,3981) | 1:A:37:VAL:HG21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 9 | 0.15 |
| (1,3981) | 1:A:37:VAL:HG22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 9 | 0.15 |
| (1,3981) | 1:A:37:VAL:HG22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 9 | 0.15 |
| (1,3981) | 1:A:37:VAL:HG23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 9 | 0.15 |
| (1,3981) | 1:A:37:VAL:HG23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 9 | 0.15 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG21 | 6 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG22 | 6 | 0.15 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG23 | 6 | 0.15 |
| (1,3813) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 9 | 0.15 |
| (1,3813) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 9 | 0.15 |
| (1,3813) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 9 | 0.15 |
| (1,3813) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 9 | 0.15 |
| (1,3813) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 9 | 0.15 |
| (1,3813) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 9 | 0.15 |
| (1,3813) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:158:TYR:HD1 | 9 | 0.15 |
| (1,3813) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:158:TYR:HD2 | 9 | 0.15 |
| (1,3813) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:158:TYR:HD1 | 9 | 0.15 |
| (1,3813) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:158:TYR:HD2 | 9 | 0.15 |
| (1,3813) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:158:TYR:HD1 | 9 | 0.15 |
| (1,3813) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:158:TYR:HD2 | 9 | 0.15 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG11 | 11 | 0.15 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG12 | 11 | 0.15 |
| (1,3667) | 1:A:32:VAL:HA | 1:A:52:VAL:HG13 | 11 | 0.15 |
| (1,3540) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 16 | 0.15 |
| (1,3469) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:112:THR:HA | 18 | 0.15 |
| (1,3398) | 1:A:28:VAL:HA | 1:A:173:GLY:HA2 | 6 | 0.15 |
| (1,3261) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:HB | 19 | 0.15 |
| (1,326) | 1:A:122:THR:H | 1:A:124:LEU:HD21 | 10 | 0.15 |
| (1,326) | 1:A:122:THR:H | 1:A:124:LEU:HD22 | 10 | 0.15 |
| (1,326) | 1:A:122:THR:H | 1:A:124:LEU:HD23 | 10 | 0.15 |
| (1,3218) | 1:A:179:GLY:HA2 | 1:A:180:GLU:HB2 | 4 | 0.15 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB2 | 3 | 0.15 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB2 | 3 | 0.15 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB2 | 3 | 0.15 |
| (1,2987) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:66:ALA:H | 17 | 0.15 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG11 | 1:A:183:ASN:HB3 | 7 | 0.15 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG12 | 1:A:183:ASN:HB3 | 7 | 0.15 |
| (1,2983) | 1:A:182:VAL:HG13 | 1:A:183:ASN:HB3 | 7 | 0.15 |
| (1,2941) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:13:LYS:HA | 7 | 0.15 |
| (1,2857) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:111:LEU:HG | 1 | 0.15 |
| (1,2857) | 1:A:105:ASP:HB2 | 1:A:111:LEU:HG | 6 | 0.15 |
| (1,2851) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:130:THR:HA | 3 | 0.15 |
| (1,2843) | 1:A:55:ASN:H | 1:A:55:ASN:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,2743) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:75:GLY:HA3 | 20 | 0.15 |
| (1,2728) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:14:GLY:HA3 | 3 | 0.15 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG21 | 1 | 0.15 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG22 | 1 | 0.15 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG23 | 1 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG21 | 1 | 0.15 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG22 | 1 | 0.15 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG23 | 1 | 0.15 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG21 | 1 | 0.15 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG22 | 1 | 0.15 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG23 | 1 | 0.15 |
| (1,2352) | 1:A:96:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG11 | 6 | 0.15 |
| (1,2352) | 1:A:96:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG12 | 6 | 0.15 |
| (1,2352) | 1:A:96:ALA:HA | 1:A:181:VAL:HG13 | 6 | 0.15 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:171:ASN:HA | 3 | 0.15 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:171:ASN:HA | 3 | 0.15 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:171:ASN:HA | 3 | 0.15 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 19 | 0.15 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 19 | 0.15 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 19 | 0.15 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG11 | 11 | 0.15 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG12 | 11 | 0.15 |
| (1,2141) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:181:VAL:HG13 | 11 | 0.15 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 14 | 0.15 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 14 | 0.15 |
| (1,2062) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 14 | 0.15 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 10 | 0.15 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 10 | 0.15 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 10 | 0.15 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 11 | 0.15 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 11 | 0.15 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 11 | 0.15 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 20 | 0.15 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 20 | 0.15 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 20 | 0.15 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE21 | 14 | 0.15 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE21 | 14 | 0.15 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE21 | 14 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE22 | 14 | 0.15 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE22 | 14 | 0.15 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE22 | 14 | 0.15 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 5 | 0.15 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 5 | 0.15 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 5 | 0.15 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 7 | 0.15 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 7 | 0.15 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 7 | 0.15 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 20 | 0.15 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 20 | 0.15 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 20 | 0.15 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:H | 18 | 0.15 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:H | 18 | 0.15 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:H | 18 | 0.15 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG21 | 16 | 0.15 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG22 | 16 | 0.15 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG23 | 16 | 0.15 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG21 | 16 | 0.15 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG22 | 16 | 0.15 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG23 | 16 | 0.15 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 16 | 0.15 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 16 | 0.15 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 16 | 0.15 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG21 | 18 | 0.15 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG22 | 18 | 0.15 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG23 | 18 | 0.15 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG21 | 18 | 0.15 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG22 | 18 | 0.15 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG23 | 18 | 0.15 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 18 | 0.15 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 18 | 0.15 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 18 | 0.15 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:59:ASN:H | 2 | 0.15 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:59:ASN:H | 2 | 0.15 |
| (1,1744) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:59:ASN:H | 2 | 0.15 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:24:ASP:H | 7 | 0.15 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:24:ASP:H | 7 | 0.15 |
| (1,1704) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:24:ASP:H | 7 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:28:VAL:H | 8 | 0.15 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:28:VAL:H | 8 | 0.15 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:28:VAL:H | 8 | 0.15 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB1 | 1 | 0.15 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB2 | 1 | 0.15 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB3 | 1 | 0.15 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB1 | 1 | 0.15 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB2 | 1 | 0.15 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB3 | 1 | 0.15 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB1 | 1 | 0.15 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB2 | 1 | 0.15 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB3 | 1 | 0.15 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 8 | 0.15 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 8 | 0.15 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 8 | 0.15 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 3 | 0.15 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 3 | 0.15 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 3 | 0.15 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 7 | 0.15 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 7 | 0.15 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 7 | 0.15 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:H | 11 | 0.15 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:H | 11 | 0.15 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:H | 11 | 0.15 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD1 | 13 | 0.15 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HD2 | 13 | 0.15 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD1 | 13 | 0.15 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HD2 | 13 | 0.15 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD1 | 13 | 0.15 |
| (1,1307) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HD2 | 13 | 0.15 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 2 | 0.15 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 2 | 0.15 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 2 | 0.15 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 2 | 0.15 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 2 | 0.15 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 2 | 0.15 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 2 | 0.15 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 2 | 0.15 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 2 | 0.15 |
| (1,1075) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:H | 11 | 0.15 |
| (1,1019) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:138:PHE:HB2 | 1 | 0.15 |
| (1,1019) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:138:PHE:HB2 | 6 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HD21 | 20 | 0.14 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HD21 | 20 | 0.14 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HD21 | 20 | 0.14 |
| (1,942) | 1:A:24:ASP:HB2 | 1:A:27:SER:H | 8 | 0.14 |
| (1,927) | 1:A:79:ASP:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 12 | 0.14 |
| (1,927) | 1:A:79:ASP:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 12 | 0.14 |
| (1,927) | 1:A:79:ASP:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 12 | 0.14 |
| (1,75) | 1:A:72:ALA:H | 1:A:155:LYS:HB3 | 7 | 0.14 |
| (1,494) | 1:A:14:GLY:HA2 | 1:A:15:GLU:H | 7 | 0.14 |
| (1,3983) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 9 | 0.14 |
| (1,3983) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 9 | 0.14 |
| (1,3983) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 9 | 0.14 |
| (1,3983) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 9 | 0.14 |
| (1,3983) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 9 | 0.14 |
| (1,3983) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 9 | 0.14 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 17 | 0.14 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 17 | 0.14 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 17 | 0.14 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 17 | 0.14 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 17 | 0.14 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 17 | 0.14 |
| (1,3818) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:54:PHE:HD1 | 10 | 0.14 |
| (1,3818) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:54:PHE:HD2 | 10 | 0.14 |
| (1,3818) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:54:PHE:HD1 | 10 | 0.14 |
| (1,3818) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:54:PHE:HD2 | 10 | 0.14 |
| (1,3818) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:54:PHE:HD1 | 10 | 0.14 |
| (1,3818) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:54:PHE:HD2 | 10 | 0.14 |
| (1,3778) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HB | 13 | 0.14 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 0.14 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 0.14 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD11 | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 0.14 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 0.14 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 0.14 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD12 | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 0.14 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 0.14 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 0.14 |
| (1,3685) | 1:A:88:LEU:HD13 | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 0.14 |
| (1,3671) | 1:A:30:GLN:HG3 | 1:A:32:VAL:HA | 3 | 0.14 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG13 | 4 | 0.14 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG13 | 4 | 0.14 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG13 | 4 | 0.14 |
| (1,3527) | 1:A:176:HIS:HB2 | 1:A:178:LYS:HE2 | 5 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3516) | 1:A:107:THR:HG21 | 1:A:120:SER:HB3 | 3 | 0.14 |
| (1,3516) | 1:A:107:THR:HG22 | 1:A:120:SER:HB3 | 3 | 0.14 |
| (1,3516) | 1:A:107:THR:HG23 | 1:A:120:SER:HB3 | 3 | 0.14 |
| (1,3415) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 16 | 0.14 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 13 | 0.14 |
| (1,3283) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:159:GLN:HG3 | 20 | 0.14 |
| (1,3273) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:159:GLN:HG2 | 2 | 0.14 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB1 | 17 | 0.14 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB2 | 17 | 0.14 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB3 | 17 | 0.14 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HB | 12 | 0.14 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HB | 12 | 0.14 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HB | 12 | 0.14 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB2 | 16 | 0.14 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB2 | 16 | 0.14 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB2 | 16 | 0.14 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB2 | 19 | 0.14 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB2 | 19 | 0.14 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB2 | 19 | 0.14 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD11 | 9 | 0.14 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD12 | 9 | 0.14 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD13 | 9 | 0.14 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD11 | 13 | 0.14 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD12 | 13 | 0.14 |
| (1,3087) | 1:A:76:THR:HB | 1:A:86:LEU:HD13 | 13 | 0.14 |
| (1,3002) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:113:LEU:HD11 | 3 | 0.14 |
| (1,3002) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:113:LEU:HD12 | 3 | 0.14 |
| (1,3002) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:113:LEU:HD13 | 3 | 0.14 |
| (1,3002) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:113:LEU:HD21 | 3 | 0.14 |
| (1,3002) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:113:LEU:HD22 | 3 | 0.14 |
| (1,3002) | 1:A:84:ASN:HB3 | 1:A:113:LEU:HD23 | 3 | 0.14 |
| (1,2987) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:66:ALA:H | 13 | 0.14 |
| (1,2864) | 1:A:89:GLN:HE21 | 1:A:178:LYS:HE3 | 20 | 0.14 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:129:ASN:HB3 | 1 | 0.14 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:129:ASN:HB3 | 1 | 0.14 |
| (1,2788) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:129:ASN:HB3 | 1 | 0.14 |
| (1,2745) | 1:A:104:LEU:HB2 | 1:A:108:GLY:HA3 | 12 | 0.14 |
| (1,2743) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:75:GLY:HA3 | 14 | 0.14 |
| (1,2726) | 1:A:8:GLY:HA2 | 1:A:9:THR:H | 6 | 0.14 |
| (1,2704) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:160:GLY:HA2 | 1 | 0.14 |
| (1,2704) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:160:GLY:HA2 | 1 | 0.14 |
| (1,2704) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:160:GLY:HA2 | 1 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2683) | 1:A:162:GLY:HA2 | 1:A:163:GLY:H | 5 | 0.14 |
| (1,2414) | 1:A:36:GLN:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 17 | 0.14 |
| (1,2414) | 1:A:36:GLN:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 17 | 0.14 |
| (1,2414) | 1:A:36:GLN:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 17 | 0.14 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 7 | 0.14 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 7 | 0.14 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 7 | 0.14 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:171:ASN:HA | 15 | 0.14 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:171:ASN:HA | 15 | 0.14 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:171:ASN:HA | 15 | 0.14 |
| (1,2317) | 1:A:44:GLN:HA | 1:A:141:GLY:HA3 | 9 | 0.14 |
| (1,2317) | 1:A:44:GLN:HA | 1:A:141:GLY:HA3 | 10 | 0.14 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG11 | 19 | 0.14 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG12 | 19 | 0.14 |
| (1,2138) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:181:VAL:HG13 | 19 | 0.14 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 5 | 0.14 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 5 | 0.14 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 5 | 0.14 |
| (1,2030) | 1:A:159:GLN:HA | 1:A:159:GLN:HG3 | 20 | 0.14 |
| (1,2016) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:118:PHE:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,2016) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:118:PHE:HB3 | 18 | 0.14 |
| (1,2016) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:118:PHE:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,2016) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:118:PHE:HB3 | 18 | 0.14 |
| (1,2016) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:118:PHE:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,2016) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:118:PHE:HB3 | 18 | 0.14 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 2 | 0.14 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 2 | 0.14 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 2 | 0.14 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 5 | 0.14 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 5 | 0.14 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 5 | 0.14 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 6 | 0.14 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 6 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 6 | 0.14 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 18 | 0.14 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 18 | 0.14 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 18 | 0.14 |
| (1,1974) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:124:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (1,1974) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:124:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,1974) | 1:A:124:LEU:HA | 1:A:124:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG11 | 20 | 0.14 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG12 | 20 | 0.14 |
| (1,1946) | 1:A:85:VAL:H | 1:A:85:VAL:HG13 | 20 | 0.14 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG21 | 11 | 0.14 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG22 | 11 | 0.14 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG23 | 11 | 0.14 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG21 | 11 | 0.14 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG22 | 11 | 0.14 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG23 | 11 | 0.14 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG21 | 11 | 0.14 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG22 | 11 | 0.14 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG23 | 11 | 0.14 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:174:THR:H | 8 | 0.14 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:174:THR:H | 8 | 0.14 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:174:THR:H | 8 | 0.14 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:HB2 | 19 | 0.14 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:HB2 | 19 | 0.14 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:HB2 | 19 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG21 | 2 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG22 | 2 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG23 | 2 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG21 | 2 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG22 | 2 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG23 | 2 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 2 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 2 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 2 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG21 | 4 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG22 | 4 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG23 | 4 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG21 | 4 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG22 | 4 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG23 | 4 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 4 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 4 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 4 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG21 | 7 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG22 | 7 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG23 | 7 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG21 | 7 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG22 | 7 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG23 | 7 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 7 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 7 | 0.14 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 7 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE1 | 8 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE2 | 8 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE1 | 8 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE2 | 8 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE1 | 8 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE2 | 8 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE1 | 15 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE2 | 15 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE1 | 15 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE2 | 15 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE1 | 15 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE2 | 15 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE1 | 17 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE2 | 17 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE1 | 17 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE2 | 17 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE1 | 17 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE2 | 17 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE1 | 19 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE2 | 19 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE1 | 19 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE2 | 19 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE1 | 19 | 0.14 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE2 | 19 | 0.14 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG21 | 1:A:176:HIS:H | 8 | 0.14 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG22 | 1:A:176:HIS:H | 8 | 0.14 |
| (1,1764) | 1:A:175:VAL:HG23 | 1:A:176:HIS:H | 8 | 0.14 |
| (1,1763) | 1:A:152:ALA:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 11 | 0.14 |
| (1,1763) | 1:A:152:ALA:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 11 | 0.14 |
| (1,1763) | 1:A:152:ALA:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 11 | 0.14 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:28:VAL:H | 6 | 0.14 |
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:28:VAL:H | 6 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1702) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:28:VAL:H | 6 | 0.14 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB1 | 8 | 0.14 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB2 | 8 | 0.14 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB3 | 8 | 0.14 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB1 | 8 | 0.14 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB2 | 8 | 0.14 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB3 | 8 | 0.14 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB1 | 8 | 0.14 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB2 | 8 | 0.14 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB3 | 8 | 0.14 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG11 | 3 | 0.14 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG12 | 3 | 0.14 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG13 | 3 | 0.14 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 19 | 0.14 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 19 | 0.14 |
| (1,1626) | 1:A:157:GLN:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 19 | 0.14 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG21 | 17 | 0.14 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG22 | 17 | 0.14 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG23 | 17 | 0.14 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG21 | 17 | 0.14 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG22 | 17 | 0.14 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG23 | 17 | 0.14 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG21 | 17 | 0.14 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG22 | 17 | 0.14 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG23 | 17 | 0.14 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 0.14 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 0.14 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 0.14 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 0.14 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 0.14 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 0.14 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG11 | 3 | 0.14 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG12 | 3 | 0.14 |
| (1,1546) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:181:VAL:HG13 | 3 | 0.14 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 10 | 0.14 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 10 | 0.14 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 10 | 0.14 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,1531) | 1:A:74:LEU:HA | 1:A:74:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:74:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:74:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:74:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:74:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:74:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:74:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 18 | 0.14 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 18 | 0.14 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 18 | 0.14 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HA | 20 | 0.14 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HA | 20 | 0.14 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HA | 20 | 0.14 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 4 | 0.14 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 4 | 0.14 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 4 | 0.14 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 4 | 0.14 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 4 | 0.14 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 4 | 0.14 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 4 | 0.14 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 4 | 0.14 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 4 | 0.14 |
| (1,1361) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:88:LEU:HA | 12 | 0.14 |
| (1,1361) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:88:LEU:HA | 12 | 0.14 |
| (1,1361) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:88:LEU:HA | 12 | 0.14 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 5 | 0.14 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 5 | 0.14 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 5 | 0.14 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 5 | 0.14 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 5 | 0.14 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 5 | 0.14 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 5 | 0.14 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 5 | 0.14 |
| (1,1276) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 5 | 0.14 |
| (1,1080) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:GLY:HA3 | 13 | 0.14 |
| (1,1075) | 1:A:74:LEU:HB2 | 1:A:153:THR:H | 4 | 0.14 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG11 | 8 | 0.13 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG12 | 8 | 0.13 |
| (1,967) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:65:VAL:HG13 | 8 | 0.13 |
| (1,844) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:64:ASN:HD22 | 17 | 0.13 |
| (1,764) | 1:A:91:SER:H | 1:A:91:SER:HB3 | 10 | 0.13 |
| (1,750) | 1:A:133:PHE:HB2 | 1:A:134:GLN:H | 6 | 0.13 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 6 | 0.13 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 6 | 0.13 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 6 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 10 | 0.13 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 10 | 0.13 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 10 | 0.13 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG21 | 14 | 0.13 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG22 | 14 | 0.13 |
| (1,6) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:175:VAL:HG23 | 14 | 0.13 |
| (1,467) | 1:A:20:ALA:H | 1:A:158:TYR:HB2 | 10 | 0.13 |
| (1,445) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:124:LEU:HD11 | 13 | 0.13 |
| (1,445) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:124:LEU:HD12 | 13 | 0.13 |
| (1,445) | 1:A:68:LYS:H | 1:A:124:LEU:HD13 | 13 | 0.13 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG21 | 12 | 0.13 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG22 | 12 | 0.13 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG23 | 12 | 0.13 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG21 | 13 | 0.13 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG22 | 13 | 0.13 |
| (1,3946) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:175:VAL:HG23 | 13 | 0.13 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD11 | 12 | 0.13 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD12 | 12 | 0.13 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD13 | 12 | 0.13 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD11 | 12 | 0.13 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD12 | 12 | 0.13 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD13 | 12 | 0.13 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:133:PHE:HE1 | 18 | 0.13 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:133:PHE:HE2 | 18 | 0.13 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:133:PHE:HE1 | 18 | 0.13 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:133:PHE:HE2 | 18 | 0.13 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:133:PHE:HE1 | 18 | 0.13 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:133:PHE:HE2 | 18 | 0.13 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:177:PHE:HD1 | 8 | 0.13 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:177:PHE:HD2 | 8 | 0.13 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:177:PHE:HD1 | 8 | 0.13 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:177:PHE:HD2 | 8 | 0.13 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:177:PHE:HD1 | 8 | 0.13 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:177:PHE:HD2 | 8 | 0.13 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:177:PHE:HD1 | 15 | 0.13 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:177:PHE:HD2 | 15 | 0.13 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:177:PHE:HD1 | 15 | 0.13 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:177:PHE:HD2 | 15 | 0.13 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:177:PHE:HD1 | 15 | 0.13 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:177:PHE:HD2 | 15 | 0.13 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 9 | 0.13 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 9 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 9 | 0.13 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 9 | 0.13 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 9 | 0.13 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 9 | 0.13 |
| (1,3878) | 1:A:49:SER:HB2 | 1:A:137:TYR:HD1 | 9 | 0.13 |
| (1,3878) | 1:A:49:SER:HB2 | 1:A:137:TYR:HD2 | 9 | 0.13 |
| (1,3878) | 1:A:49:SER:HB3 | 1:A:137:TYR:HD1 | 9 | 0.13 |
| (1,3878) | 1:A:49:SER:HB3 | 1:A:137:TYR:HD2 | 9 | 0.13 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD1 | 5 | 0.13 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD2 | 5 | 0.13 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD1 | 5 | 0.13 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD2 | 5 | 0.13 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD1 | 5 | 0.13 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD2 | 5 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 13 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 13 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 13 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD21 | 13 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD22 | 13 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD23 | 13 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 13 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 13 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 13 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD21 | 13 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD22 | 13 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD23 | 13 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 14 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 14 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 14 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD21 | 14 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD22 | 14 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD23 | 14 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 14 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 14 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 14 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD21 | 14 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD22 | 14 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD23 | 14 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 16 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 16 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 16 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD21 | 16 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD22 | 16 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD23 | 16 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 16 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 16 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 16 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD21 | 16 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD22 | 16 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD23 | 16 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 18 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 18 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 18 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD21 | 18 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD22 | 18 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD23 | 18 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 18 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 18 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 18 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD21 | 18 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD22 | 18 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD23 | 18 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 19 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 19 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 19 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD21 | 19 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD22 | 19 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD23 | 19 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 19 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 19 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 19 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD21 | 19 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD22 | 19 | 0.13 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD23 | 19 | 0.13 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG11 | 11 | 0.13 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG12 | 11 | 0.13 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:170:VAL:HG13 | 11 | 0.13 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG11 | 11 | 0.13 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG12 | 11 | 0.13 |
| (1,3817) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:170:VAL:HG13 | 11 | 0.13 |
| (1,3778) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HB | 20 | 0.13 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:103:ILE:HG13 | 7 | 0.13 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:103:ILE:HG13 | 7 | 0.13 |
| (1,3656) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:103:ILE:HG13 | 7 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,365) | 1:A:137:TYR:HB2 | 1:A:138:PHE:H | 10 | 0.13 |
| (1,3632) | 1:A:144:THR:HB | 1:A:145:PRO:HG3 | 7 | 0.13 |
| (1,3605) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:104:LEU:HG | 6 | 0.13 |
| (1,3605) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:104:LEU:HG | 6 | 0.13 |
| (1,3605) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:104:LEU:HG | 6 | 0.13 |
| (1,3605) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:104:LEU:HG | 17 | 0.13 |
| (1,3605) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:104:LEU:HG | 17 | 0.13 |
| (1,3605) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:104:LEU:HG | 17 | 0.13 |
| (1,3584) | 1:A:107:THR:HA | 1:A:107:THR:HG21 | 3 | 0.13 |
| (1,3584) | 1:A:107:THR:HA | 1:A:107:THR:HG22 | 3 | 0.13 |
| (1,3584) | 1:A:107:THR:HA | 1:A:107:THR:HG23 | 3 | 0.13 |
| (1,3584) | 1:A:107:THR:HA | 1:A:107:THR:HG21 | 8 | 0.13 |
| (1,3584) | 1:A:107:THR:HA | 1:A:107:THR:HG22 | 8 | 0.13 |
| (1,3584) | 1:A:107:THR:HA | 1:A:107:THR:HG23 | 8 | 0.13 |
| (1,3584) | 1:A:107:THR:HA | 1:A:107:THR:HG21 | 9 | 0.13 |
| (1,3584) | 1:A:107:THR:HA | 1:A:107:THR:HG22 | 9 | 0.13 |
| (1,3584) | 1:A:107:THR:HA | 1:A:107:THR:HG23 | 9 | 0.13 |
| (1,3584) | 1:A:107:THR:HA | 1:A:107:THR:HG21 | 10 | 0.13 |
| (1,3584) | 1:A:107:THR:HA | 1:A:107:THR:HG22 | 10 | 0.13 |
| (1,3584) | 1:A:107:THR:HA | 1:A:107:THR:HG23 | 10 | 0.13 |
| (1,3540) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 10 | 0.13 |
| (1,3505) | 1:A:106:ARG:HB2 | 1:A:132:PRO:HG2 | 8 | 0.13 |
| (1,3505) | 1:A:106:ARG:HB2 | 1:A:132:PRO:HG3 | 8 | 0.13 |
| (1,3499) | 1:A:50:SER:HB3 | 1:A:51:ALA:H | 18 | 0.13 |
| (1,3415) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:15:GLU:HB2 | 4 | 0.13 |
| (1,3283) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:159:GLN:HG3 | 1 | 0.13 |
| (1,326) | 1:A:122:THR:H | 1:A:124:LEU:HD21 | 15 | 0.13 |
| (1,326) | 1:A:122:THR:H | 1:A:124:LEU:HD22 | 15 | 0.13 |
| (1,326) | 1:A:122:THR:H | 1:A:124:LEU:HD23 | 15 | 0.13 |
| (1,3219) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:180:GLU:HB2 | 1 | 0.13 |
| (1,3219) | 1:A:36:GLN:HG2 | 1:A:180:GLU:HB2 | 1 | 0.13 |
| (1,3215) | 1:A:179:GLY:HA3 | 1:A:180:GLU:HB2 | 4 | 0.13 |
| (1,2924) | 1:A:59:ASN:HB2 | 1:A:128:THR:HA | 4 | 0.13 |
| (1,2878) | 1:A:115:GLY:HA2 | 1:A:155:LYS:HE3 | 11 | 0.13 |
| (1,2858) | 1:A:28:VAL:H | 1:A:29:ASP:HB3 | 10 | 0.13 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG21 | 12 | 0.13 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG22 | 12 | 0.13 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG23 | 12 | 0.13 |
| (1,2492) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:133:PHE:HB2 | 20 | 0.13 |
| (1,2492) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:133:PHE:HB2 | 20 | 0.13 |
| (1,2492) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:133:PHE:HB2 | 20 | 0.13 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG21 | 2 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG22 | 2 | 0.13 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG23 | 2 | 0.13 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG21 | 2 | 0.13 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG22 | 2 | 0.13 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG23 | 2 | 0.13 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG21 | 2 | 0.13 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG22 | 2 | 0.13 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG23 | 2 | 0.13 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG21 | 11 | 0.13 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG22 | 11 | 0.13 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG23 | 11 | 0.13 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG21 | 11 | 0.13 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG22 | 11 | 0.13 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG23 | 11 | 0.13 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG21 | 11 | 0.13 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG22 | 11 | 0.13 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG23 | 11 | 0.13 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:171:ASN:HA | 5 | 0.13 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:171:ASN:HA | 5 | 0.13 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:171:ASN:HA | 5 | 0.13 |
| (1,2327) | 1:A:170:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 6 | 0.13 |
| (1,2327) | 1:A:170:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 6 | 0.13 |
| (1,2327) | 1:A:170:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 6 | 0.13 |
| (1,2327) | 1:A:170:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG11 | 7 | 0.13 |
| (1,2327) | 1:A:170:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG12 | 7 | 0.13 |
| (1,2327) | 1:A:170:VAL:H | 1:A:170:VAL:HG13 | 7 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:77:ALA:HB1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 12 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:77:ALA:HB1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 12 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:77:ALA:HB1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 12 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:77:ALA:HB1 | 1:A:113:LEU:HD21 | 12 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:77:ALA:HB1 | 1:A:113:LEU:HD22 | 12 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:77:ALA:HB1 | 1:A:113:LEU:HD23 | 12 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:77:ALA:HB2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 12 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:77:ALA:HB2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 12 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:77:ALA:HB2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 12 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:77:ALA:HB2 | 1:A:113:LEU:HD21 | 12 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:77:ALA:HB2 | 1:A:113:LEU:HD22 | 12 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:77:ALA:HB2 | 1:A:113:LEU:HD23 | 12 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:77:ALA:HB3 | 1:A:113:LEU:HD11 | 12 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:77:ALA:HB3 | 1:A:113:LEU:HD12 | 12 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:77:ALA:HB3 | 1:A:113:LEU:HD13 | 12 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:77:ALA:HB3 | 1:A:113:LEU:HD21 | 12 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2306) | 1:A:77:ALA:HB3 | 1:A:113:LEU:HD22 | 12 | 0.13 |
| (1,2306) | 1:A:77:ALA:HB3 | 1:A:113:LEU:HD23 | 12 | 0.13 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 12 | 0.13 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 12 | 0.13 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 12 | 0.13 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 14 | 0.13 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 14 | 0.13 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 14 | 0.13 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB1 | 12 | 0.13 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB2 | 12 | 0.13 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB3 | 12 | 0.13 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB1 | 12 | 0.13 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB2 | 12 | 0.13 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB3 | 12 | 0.13 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB1 | 12 | 0.13 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB2 | 12 | 0.13 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB3 | 12 | 0.13 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:177:PHE:HZ | 7 | 0.13 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:177:PHE:HZ | 7 | 0.13 |
| (1,2221) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:177:PHE:HZ | 7 | 0.13 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB1 | 6 | 0.13 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB2 | 6 | 0.13 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB1 | 15 | 0.13 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB3 | 15 | 0.13 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB1 | 18 | 0.13 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB2 | 18 | 0.13 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB3 | 18 | 0.13 |
| (1,2178) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HB | 10 | 0.13 |
| (1,2178) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HB | 10 | 0.13 |
| (1,2178) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HB | 10 | 0.13 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HB | 5 | 0.13 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HB | 5 | 0.13 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HB | 5 | 0.13 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HB | 11 | 0.13 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HB | 11 | 0.13 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HB | 11 | 0.13 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG21 | 10 | 0.13 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG22 | 10 | 0.13 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HG23 | 10 | 0.13 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG21 | 10 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG22 | 10 | 0.13 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HG23 | 10 | 0.13 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG21 | 10 | 0.13 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG22 | 10 | 0.13 |
| (1,2117) | 1:A:69:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HG23 | 10 | 0.13 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 5 | 0.13 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 5 | 0.13 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 5 | 0.13 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 5 | 0.13 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 5 | 0.13 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 5 | 0.13 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 5 | 0.13 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 5 | 0.13 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 5 | 0.13 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 14 | 0.13 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 14 | 0.13 |
| (1,2078) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 14 | 0.13 |
| (1,2074) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 18 | 0.13 |
| (1,2074) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 18 | 0.13 |
| (1,2074) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 18 | 0.13 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 17 | 0.13 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 17 | 0.13 |
| (1,2065) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 17 | 0.13 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA3 | 14 | 0.13 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA3 | 14 | 0.13 |
| (1,2013) | 1:A:156:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA3 | 14 | 0.13 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 3 | 0.13 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 3 | 0.13 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 3 | 0.13 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 17 | 0.13 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 17 | 0.13 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 17 | 0.13 |
| (1,1971) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:125:ASN:H | 18 | 0.13 |
| (1,1971) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:125:ASN:H | 18 | 0.13 |
| (1,1971) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:125:ASN:H | 18 | 0.13 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 1 | 0.13 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 1 | 0.13 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 1 | 0.13 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:174:THR:H | 17 | 0.13 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:174:THR:H | 17 | 0.13 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:174:THR:H | 17 | 0.13 |
| (1,1833) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:59:ASN:HD22 | 8 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1833) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:59:ASN:HD22 | 8 | 0.13 |
| (1,1833) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:59:ASN:HD22 | 8 | 0.13 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG21 | 11 | 0.13 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG22 | 11 | 0.13 |
| (1,1807) | 1:A:181:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG23 | 11 | 0.13 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:H | 13 | 0.13 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:H | 13 | 0.13 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:H | 13 | 0.13 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:HB2 | 6 | 0.13 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:HB2 | 6 | 0.13 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:HB2 | 6 | 0.13 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:HB2 | 7 | 0.13 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:HB2 | 7 | 0.13 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:HB2 | 7 | 0.13 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG21 | 9 | 0.13 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG22 | 9 | 0.13 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG23 | 9 | 0.13 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG21 | 9 | 0.13 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG22 | 9 | 0.13 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG23 | 9 | 0.13 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 9 | 0.13 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 9 | 0.13 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 9 | 0.13 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG21 | 12 | 0.13 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG22 | 12 | 0.13 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG23 | 12 | 0.13 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG21 | 12 | 0.13 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG22 | 12 | 0.13 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG23 | 12 | 0.13 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 12 | 0.13 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 12 | 0.13 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 12 | 0.13 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:157:GLN:H | 4 | 0.13 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:157:GLN:H | 4 | 0.13 |
| (1,1788) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:157:GLN:H | 4 | 0.13 |
| (1,1690) | 1:A:144:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 18 | 0.13 |
| (1,1690) | 1:A:144:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 18 | 0.13 |
| (1,1690) | 1:A:144:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 18 | 0.13 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB1 | 12 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB2 | 12 | 0.13 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB3 | 12 | 0.13 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB1 | 12 | 0.13 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB2 | 12 | 0.13 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB3 | 12 | 0.13 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB1 | 12 | 0.13 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB2 | 12 | 0.13 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB3 | 12 | 0.13 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:H | 3 | 0.13 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:H | 3 | 0.13 |
| (1,1670) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:H | 3 | 0.13 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG11 | 7 | 0.13 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG12 | 7 | 0.13 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG13 | 7 | 0.13 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG11 | 8 | 0.13 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG12 | 8 | 0.13 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG13 | 8 | 0.13 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG11 | 18 | 0.13 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG12 | 18 | 0.13 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG13 | 18 | 0.13 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 8 | 0.13 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 8 | 0.13 |
| (1,1641) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 8 | 0.13 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB1 | 1:A:169:THR:HG21 | 13 | 0.13 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB1 | 1:A:169:THR:HG22 | 13 | 0.13 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB1 | 1:A:169:THR:HG23 | 13 | 0.13 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB2 | 1:A:169:THR:HG21 | 13 | 0.13 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB2 | 1:A:169:THR:HG22 | 13 | 0.13 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB2 | 1:A:169:THR:HG23 | 13 | 0.13 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 13 | 0.13 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 13 | 0.13 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 13 | 0.13 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB1 | 1:A:169:THR:HG21 | 15 | 0.13 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB1 | 1:A:169:THR:HG22 | 15 | 0.13 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB1 | 1:A:169:THR:HG23 | 15 | 0.13 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB2 | 1:A:169:THR:HG21 | 15 | 0.13 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB2 | 1:A:169:THR:HG22 | 15 | 0.13 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB2 | 1:A:169:THR:HG23 | 15 | 0.13 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 15 | 0.13 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 15 | 0.13 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 15 | 0.13 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:74:LEU:HD21 | 2 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:74:LEU:HD22 | 2 | 0.13 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:74:LEU:HD23 | 2 | 0.13 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:74:LEU:HD21 | 2 | 0.13 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:74:LEU:HD22 | 2 | 0.13 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:74:LEU:HD23 | 2 | 0.13 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:74:LEU:HD21 | 2 | 0.13 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:74:LEU:HD22 | 2 | 0.13 |
| (1,1527) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:74:LEU:HD23 | 2 | 0.13 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:H | 16 | 0.13 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:H | 16 | 0.13 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:H | 16 | 0.13 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 11 | 0.13 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 11 | 0.13 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 11 | 0.13 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:145:PRO:HG2 | 19 | 0.13 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:145:PRO:HG2 | 19 | 0.13 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:145:PRO:HG2 | 19 | 0.13 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:H | 2 | 0.13 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:H | 2 | 0.13 |
| (1,1376) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:H | 2 | 0.13 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG21 | 17 | 0.13 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG22 | 17 | 0.13 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HG23 | 17 | 0.13 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG21 | 17 | 0.13 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG22 | 17 | 0.13 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HG23 | 17 | 0.13 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG21 | 17 | 0.13 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG22 | 17 | 0.13 |
| (1,1367) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HG23 | 17 | 0.13 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HB1 | 10 | 0.13 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HB2 | 10 | 0.13 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HB3 | 10 | 0.13 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HB1 | 10 | 0.13 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HB2 | 10 | 0.13 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HB3 | 10 | 0.13 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HB1 | 10 | 0.13 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HB2 | 10 | 0.13 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HB3 | 10 | 0.13 |
| (1,1215) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:65:VAL:HG21 | 8 | 0.13 |
| (1,1215) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:65:VAL:HG22 | 8 | 0.13 |
| (1,1215) | 1:A:21:CYS:H | 1:A:65:VAL:HG23 | 8 | 0.13 |
| (1,1106) | 1:A:74:LEU:HB3 | 1:A:115:GLY:H | 13 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,942) | 1:A:24:ASP:HB2 | 1:A:27:SER:H | 10 | 0.12 |
| (1,742) | 1:A:125:ASN:H | 1:A:125:ASN:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,596) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:30:GLN:HG3 | 14 | 0.12 |
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 9 | 0.12 |
| (1,528) | 1:A:126:ASN:H | 1:A:126:ASN:HB2 | 4 | 0.12 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG21 | 1:A:57:GLN:H | 2 | 0.12 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG22 | 1:A:57:GLN:H | 2 | 0.12 |
| (1,49) | 1:A:23:VAL:HG23 | 1:A:57:GLN:H | 2 | 0.12 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE1 | 18 | 0.12 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD11 | 1:A:158:TYR:HE2 | 18 | 0.12 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE1 | 18 | 0.12 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD12 | 1:A:158:TYR:HE2 | 18 | 0.12 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE1 | 18 | 0.12 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD13 | 1:A:158:TYR:HE2 | 18 | 0.12 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:158:TYR:HE1 | 18 | 0.12 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD21 | 1:A:158:TYR:HE2 | 18 | 0.12 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:158:TYR:HE1 | 18 | 0.12 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD22 | 1:A:158:TYR:HE2 | 18 | 0.12 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:158:TYR:HE1 | 18 | 0.12 |
| (1,3997) | 1:A:124:LEU:HD23 | 1:A:158:TYR:HE2 | 18 | 0.12 |
| (1,3993) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:158:TYR:HE1 | 5 | 0.12 |
| (1,3993) | 1:A:156:VAL:HB | 1:A:158:TYR:HE2 | 5 | 0.12 |
| (1,3979) | 1:A:137:TYR:HE1 | 1:A:148:ALA:HA | 9 | 0.12 |
| (1,3979) | 1:A:137:TYR:HE2 | 1:A:148:ALA:HA | 9 | 0.12 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG21 | 1:A:82:HIS:HD2 | 3 | 0.12 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG22 | 1:A:82:HIS:HD2 | 3 | 0.12 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG23 | 1:A:82:HIS:HD2 | 3 | 0.12 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG21 | 1:A:176:HIS:HD2 | 15 | 0.12 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG22 | 1:A:176:HIS:HD2 | 15 | 0.12 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG23 | 1:A:176:HIS:HD2 | 15 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:73:PHE:HE1 | 8 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:73:PHE:HE2 | 8 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:73:PHE:HE1 | 8 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:73:PHE:HE2 | 8 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:73:PHE:HE1 | 8 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:73:PHE:HE2 | 8 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:73:PHE:HE1 | 9 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:73:PHE:HE2 | 9 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:73:PHE:HE1 | 9 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:73:PHE:HE2 | 9 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:73:PHE:HE1 | 9 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:73:PHE:HE2 | 9 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:73:PHE:HE1 | 13 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:73:PHE:HE2 | 13 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:73:PHE:HE1 | 13 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:73:PHE:HE2 | 13 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:73:PHE:HE1 | 13 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:73:PHE:HE2 | 13 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:73:PHE:HE1 | 16 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:73:PHE:HE2 | 16 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:73:PHE:HE1 | 16 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:73:PHE:HE2 | 16 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:73:PHE:HE1 | 16 | 0.12 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:73:PHE:HE2 | 16 | 0.12 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE1 | 5 | 0.12 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE2 | 5 | 0.12 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE1 | 8 | 0.12 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE2 | 8 | 0.12 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE1 | 11 | 0.12 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE2 | 11 | 0.12 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE1 | 15 | 0.12 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE2 | 15 | 0.12 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:133:PHE:HE1 | 3 | 0.12 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:133:PHE:HE2 | 3 | 0.12 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:133:PHE:HE1 | 3 | 0.12 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:133:PHE:HE2 | 3 | 0.12 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:133:PHE:HE1 | 3 | 0.12 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:133:PHE:HE2 | 3 | 0.12 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:133:PHE:HE1 | 14 | 0.12 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:133:PHE:HE2 | 14 | 0.12 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:133:PHE:HE1 | 14 | 0.12 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:133:PHE:HE2 | 14 | 0.12 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:133:PHE:HE1 | 14 | 0.12 |
| (1,3903) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:133:PHE:HE2 | 14 | 0.12 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:177:PHE:HD1 | 10 | 0.12 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:177:PHE:HD2 | 10 | 0.12 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:177:PHE:HD1 | 10 | 0.12 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:177:PHE:HD2 | 10 | 0.12 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:177:PHE:HD1 | 10 | 0.12 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:177:PHE:HD2 | 10 | 0.12 |
| (1,3886) | 1:A:151:ASP:HA | 1:A:177:PHE:HD1 | 12 | 0.12 |
| (1,3886) | 1:A:151:ASP:HA | 1:A:177:PHE:HD2 | 12 | 0.12 |
| (1,3882) | 1:A:34:LEU:HG | 1:A:177:PHE:HD1 | 9 | 0.12 |
| (1,3882) | 1:A:34:LEU:HG | 1:A:177:PHE:HD2 | 9 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 5 | 0.12 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 5 | 0.12 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 5 | 0.12 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 5 | 0.12 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 5 | 0.12 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 5 | 0.12 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 13 | 0.12 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 13 | 0.12 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 13 | 0.12 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 13 | 0.12 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 13 | 0.12 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 13 | 0.12 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 19 | 0.12 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 19 | 0.12 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 19 | 0.12 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 19 | 0.12 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 19 | 0.12 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 19 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 3 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 3 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 3 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD21 | 3 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD22 | 3 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD23 | 3 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 3 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 3 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 3 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD21 | 3 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD22 | 3 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD23 | 3 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 4 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 4 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 4 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 4 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 4 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 4 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 11 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 11 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 11 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD21 | 11 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD22 | 11 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD23 | 11 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 11 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 11 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 11 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD21 | 11 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD22 | 11 | 0.12 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD23 | 11 | 0.12 |
| (1,3847) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:154:PHE:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,3847) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:154:PHE:HB3 | 5 | 0.12 |
| (1,3847) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:154:PHE:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,3847) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:154:PHE:HB3 | 5 | 0.12 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 5 | 0.12 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 5 | 0.12 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 5 | 0.12 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 5 | 0.12 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 5 | 0.12 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 5 | 0.12 |
| (1,3836) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:154:PHE:HD1 | 8 | 0.12 |
| (1,3836) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:154:PHE:HD2 | 8 | 0.12 |
| (1,3836) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:154:PHE:HD1 | 8 | 0.12 |
| (1,3836) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:154:PHE:HD2 | 8 | 0.12 |
| (1,3836) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:154:PHE:HD1 | 8 | 0.12 |
| (1,3836) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:154:PHE:HD2 | 8 | 0.12 |
| (1,3836) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:154:PHE:HD1 | 16 | 0.12 |
| (1,3836) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:154:PHE:HD2 | 16 | 0.12 |
| (1,3836) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:154:PHE:HD1 | 16 | 0.12 |
| (1,3836) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:154:PHE:HD2 | 16 | 0.12 |
| (1,3836) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:154:PHE:HD1 | 16 | 0.12 |
| (1,3836) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:154:PHE:HD2 | 16 | 0.12 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:H | 15 | 0.12 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:H | 15 | 0.12 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:H | 15 | 0.12 |
| (1,3778) | 1:A:106:ARG:HG2 | 1:A:107:THR:HB | 7 | 0.12 |
| (1,3722) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:177:PHE:HE1 | 12 | 0.12 |
| (1,3722) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:177:PHE:HE2 | 12 | 0.12 |
| (1,3722) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:177:PHE:HE1 | 12 | 0.12 |
| (1,3722) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:177:PHE:HE2 | 12 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3722) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:177:PHE:HE1 | 12 | 0.12 |
| (1,3722) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:177:PHE:HE2 | 12 | 0.12 |
| (1,3628) | 1:A:85:VAL:HA | 1:A:86:LEU:HG | 12 | 0.12 |
| (1,3584) | 1:A:107:THR:HA | 1:A:107:THR:HG21 | 17 | 0.12 |
| (1,3584) | 1:A:107:THR:HA | 1:A:107:THR:HG22 | 17 | 0.12 |
| (1,3584) | 1:A:107:THR:HA | 1:A:107:THR:HG23 | 17 | 0.12 |
| (1,3565) | 1:A:107:THR:HA | 1:A:108:GLY:HA2 | 18 | 0.12 |
| (1,3479) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:155:LYS:HD2 | 7 | 0.12 |
| (1,3479) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:155:LYS:HD3 | 7 | 0.12 |
| (1,3479) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:155:LYS:HD2 | 7 | 0.12 |
| (1,3479) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:155:LYS:HD3 | 7 | 0.12 |
| (1,3479) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:155:LYS:HD2 | 7 | 0.12 |
| (1,3479) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:155:LYS:HD3 | 7 | 0.12 |
| (1,3469) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:112:THR:HA | 12 | 0.12 |
| (1,3273) | 1:A:68:LYS:HD2 | 1:A:159:GLN:HG2 | 12 | 0.12 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB1 | 19 | 0.12 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB2 | 19 | 0.12 |
| (1,3269) | 1:A:159:GLN:HG3 | 1:A:167:ALA:HB3 | 19 | 0.12 |
| (1,3214) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:157:GLN:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG2 | 17 | 0.12 |
| (1,3208) | 1:A:104:LEU:HB3 | 1:A:134:GLN:HG3 | 17 | 0.12 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG21 | 1 | 0.12 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG22 | 1 | 0.12 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG23 | 1 | 0.12 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG21 | 4 | 0.12 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG22 | 4 | 0.12 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG23 | 4 | 0.12 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG21 | 5 | 0.12 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG22 | 5 | 0.12 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG23 | 5 | 0.12 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG21 | 20 | 0.12 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG22 | 20 | 0.12 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG23 | 20 | 0.12 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HB | 17 | 0.12 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HB | 17 | 0.12 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HB | 17 | 0.12 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HB | 19 | 0.12 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HB | 19 | 0.12 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HB | 19 | 0.12 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB3 | 18 | 0.12 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB3 | 18 | 0.12 |
| (1,3166) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB3 | 18 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,312) | 1:A:5:VAL:HG11 | 1:A:10:VAL:H | 6 | 0.12 |
| (1,312) | 1:A:5:VAL:HG12 | 1:A:10:VAL:H | 6 | 0.12 |
| (1,312) | 1:A:5:VAL:HG13 | 1:A:10:VAL:H | 6 | 0.12 |
| (1,312) | 1:A:5:VAL:HG21 | 1:A:10:VAL:H | 6 | 0.12 |
| (1,312) | 1:A:5:VAL:HG22 | 1:A:10:VAL:H | 6 | 0.12 |
| (1,312) | 1:A:5:VAL:HG23 | 1:A:10:VAL:H | 6 | 0.12 |
| (1,2987) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:66:ALA:H | 10 | 0.12 |
| (1,2969) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:19:ALA:HB1 | 11 | 0.12 |
| (1,2969) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:19:ALA:HB2 | 11 | 0.12 |
| (1,2969) | 1:A:18:ASN:HB2 | 1:A:19:ALA:HB3 | 11 | 0.12 |
| (1,2889) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:155:LYS:HE2 | 12 | 0.12 |
| (1,2889) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:155:LYS:HE2 | 12 | 0.12 |
| (1,2889) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:155:LYS:HE2 | 12 | 0.12 |
| (1,2878) | 1:A:115:GLY:HA2 | 1:A:155:LYS:HE3 | 8 | 0.12 |
| (1,2870) | 1:A:31:THR:HG21 | 1:A:178:LYS:HE3 | 14 | 0.12 |
| (1,2870) | 1:A:31:THR:HG22 | 1:A:178:LYS:HE3 | 14 | 0.12 |
| (1,2870) | 1:A:31:THR:HG23 | 1:A:178:LYS:HE3 | 14 | 0.12 |
| (1,2860) | 1:A:105:ASP:HB3 | 1:A:119:SER:HB3 | 18 | 0.12 |
| (1,2851) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:130:THR:HA | 9 | 0.12 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG11 | 1:A:38:ARG:HD2 | 20 | 0.12 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG11 | 1:A:38:ARG:HD3 | 20 | 0.12 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG12 | 1:A:38:ARG:HD2 | 20 | 0.12 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG12 | 1:A:38:ARG:HD3 | 20 | 0.12 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG13 | 1:A:38:ARG:HD2 | 20 | 0.12 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG13 | 1:A:38:ARG:HD3 | 20 | 0.12 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG21 | 1:A:38:ARG:HD2 | 20 | 0.12 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG21 | 1:A:38:ARG:HD3 | 20 | 0.12 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG22 | 1:A:38:ARG:HD2 | 20 | 0.12 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG22 | 1:A:38:ARG:HD3 | 20 | 0.12 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG23 | 1:A:38:ARG:HD2 | 20 | 0.12 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG23 | 1:A:38:ARG:HD3 | 20 | 0.12 |
| (1,2799) | 1:A:86:LEU:HB3 | 1:A:103:ILE:HD11 | 12 | 0.12 |
| (1,2799) | 1:A:86:LEU:HB3 | 1:A:103:ILE:HD12 | 12 | 0.12 |
| (1,2799) | 1:A:86:LEU:HB3 | 1:A:103:ILE:HD13 | 12 | 0.12 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG11 | 1:A:53:GLY:HA3 | 10 | 0.12 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG12 | 1:A:53:GLY:HA3 | 10 | 0.12 |
| (1,2718) | 1:A:52:VAL:HG13 | 1:A:53:GLY:HA3 | 10 | 0.12 |
| (1,2655) | 1:A:130:THR:HA | 1:A:131:ILE:HD11 | 20 | 0.12 |
| (1,2655) | 1:A:130:THR:HA | 1:A:131:ILE:HD12 | 20 | 0.12 |
| (1,2655) | 1:A:130:THR:HA | 1:A:131:ILE:HD13 | 20 | 0.12 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG21 | 7 | 0.12 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG22 | 7 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG23 | 7 | 0.12 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG21 | 17 | 0.12 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG22 | 17 | 0.12 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG23 | 17 | 0.12 |
| (1,2561) | 1:A:152:ALA:HA | 1:A:153:THR:HG21 | 10 | 0.12 |
| (1,2561) | 1:A:152:ALA:HA | 1:A:153:THR:HG22 | 10 | 0.12 |
| (1,2561) | 1:A:152:ALA:HA | 1:A:153:THR:HG23 | 10 | 0.12 |
| (1,250) | 1:A:104:LEU:HD11 | 1:A:109:ALA:H | 12 | 0.12 |
| (1,250) | 1:A:104:LEU:HD12 | 1:A:109:ALA:H | 12 | 0.12 |
| (1,250) | 1:A:104:LEU:HD13 | 1:A:109:ALA:H | 12 | 0.12 |
| (1,2492) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:133:PHE:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,2492) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:133:PHE:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,2492) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:133:PHE:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,2485) | 1:A:103:ILE:HG21 | 1:A:135:ALA:H | 12 | 0.12 |
| (1,2485) | 1:A:103:ILE:HG22 | 1:A:135:ALA:H | 12 | 0.12 |
| (1,2485) | 1:A:103:ILE:HG23 | 1:A:135:ALA:H | 12 | 0.12 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB1 | 14 | 0.12 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB3 | 14 | 0.12 |
| (1,2414) | 1:A:36:GLN:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 4 | 0.12 |
| (1,2414) | 1:A:36:GLN:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 4 | 0.12 |
| (1,2414) | 1:A:36:GLN:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 4 | 0.12 |
| (1,2414) | 1:A:36:GLN:HB2 | 1:A:182:VAL:HG11 | 16 | 0.12 |
| (1,2414) | 1:A:36:GLN:HB2 | 1:A:182:VAL:HG12 | 16 | 0.12 |
| (1,2414) | 1:A:36:GLN:HB2 | 1:A:182:VAL:HG13 | 16 | 0.12 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 14 | 0.12 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 14 | 0.12 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 14 | 0.12 |
| (1,2391) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:93:ALA:HA | 1 | 0.12 |
| (1,2391) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:93:ALA:HA | 1 | 0.12 |
| (1,2391) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:93:ALA:HA | 1 | 0.12 |
| (1,2391) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:93:ALA:HA | 19 | 0.12 |
| (1,2391) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:93:ALA:HA | 19 | 0.12 |
| (1,2391) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:93:ALA:HA | 19 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG21 | 7 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG22 | 7 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG23 | 7 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG21 | 7 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG22 | 7 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG23 | 7 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG21 | 7 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG22 | 7 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG23 | 7 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG21 | 10 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG22 | 10 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG23 | 10 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG21 | 10 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG22 | 10 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG23 | 10 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG21 | 10 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG22 | 10 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG23 | 10 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG21 | 13 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG22 | 13 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG23 | 13 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG21 | 13 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG22 | 13 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG23 | 13 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG21 | 13 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG22 | 13 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG23 | 13 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG21 | 17 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG22 | 17 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG23 | 17 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG21 | 17 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG22 | 17 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG23 | 17 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG21 | 17 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG22 | 17 | 0.12 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG23 | 17 | 0.12 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG21 | 8 | 0.12 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG22 | 8 | 0.12 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG23 | 8 | 0.12 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG21 | 8 | 0.12 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG22 | 8 | 0.12 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG23 | 8 | 0.12 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG21 | 8 | 0.12 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG22 | 8 | 0.12 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG23 | 8 | 0.12 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG21 | 8 | 0.12 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG22 | 8 | 0.12 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG23 | 8 | 0.12 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG21 | 18 | 0.12 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG22 | 18 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG23 | 18 | 0.12 |
| (1,2317) | 1:A:44:GLN:HA | 1:A:141:GLY:HA3 | 15 | 0.12 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD21 | 14 | 0.12 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD22 | 14 | 0.12 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:111:LEU:HD23 | 14 | 0.12 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD21 | 14 | 0.12 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD22 | 14 | 0.12 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:111:LEU:HD23 | 14 | 0.12 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD21 | 14 | 0.12 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD22 | 14 | 0.12 |
| (1,2285) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:111:LEU:HD23 | 14 | 0.12 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 1 | 0.12 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 1 | 0.12 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 1 | 0.12 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG21 | 1:A:136:ARG:HA | 16 | 0.12 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG22 | 1:A:136:ARG:HA | 16 | 0.12 |
| (1,2247) | 1:A:101:VAL:HG23 | 1:A:136:ARG:HA | 16 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB1 | 7 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB2 | 7 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB3 | 7 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB1 | 7 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB2 | 7 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB3 | 7 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB1 | 7 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB2 | 7 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB3 | 7 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB1 | 8 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB1 | 8 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB1 | 8 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB1 | 10 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB2 | 10 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB3 | 10 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB1 | 10 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB2 | 10 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB3 | 10 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB1 | 10 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB2 | 10 | 0.12 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB3 | 10 | 0.12 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB1 | 2 | 0.12 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB2 | 2 | 0.12 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB3 | 2 | 0.12 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB1 | 4 | 0.12 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB2 | 4 | 0.12 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB3 | 4 | 0.12 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB1 | 10 | 0.12 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB2 | 10 | 0.12 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB3 | 10 | 0.12 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB1 | 14 | 0.12 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB3 | 14 | 0.12 |
| (1,2208) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:51:ALA:HB1 | 14 | 0.12 |
| (1,2208) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:51:ALA:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,2208) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:51:ALA:HB3 | 14 | 0.12 |
| (1,2207) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:52:VAL:H | 3 | 0.12 |
| (1,2207) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:52:VAL:H | 3 | 0.12 |
| (1,2207) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:52:VAL:H | 3 | 0.12 |
| (1,2207) | 1:A:51:ALA:HB1 | 1:A:52:VAL:H | 11 | 0.12 |
| (1,2207) | 1:A:51:ALA:HB2 | 1:A:52:VAL:H | 11 | 0.12 |
| (1,2207) | 1:A:51:ALA:HB3 | 1:A:52:VAL:H | 11 | 0.12 |
| (1,2206) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:43:ALA:HB1 | 11 | 0.12 |
| (1,2206) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:43:ALA:HB2 | 11 | 0.12 |
| (1,2206) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:43:ALA:HB3 | 11 | 0.12 |
| (1,2206) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:43:ALA:HB1 | 19 | 0.12 |
| (1,2206) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:43:ALA:HB2 | 19 | 0.12 |
| (1,2206) | 1:A:42:LEU:HA | 1:A:43:ALA:HB3 | 19 | 0.12 |
| (1,2178) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HB | 20 | 0.12 |
| (1,2178) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HB | 20 | 0.12 |
| (1,2178) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HB | 20 | 0.12 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HB | 2 | 0.12 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HB | 2 | 0.12 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HB | 2 | 0.12 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HB | 3 | 0.12 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HB | 3 | 0.12 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HB | 3 | 0.12 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HB | 6 | 0.12 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HB | 6 | 0.12 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HB | 6 | 0.12 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HB | 16 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HB | 16 | 0.12 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HB | 16 | 0.12 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HB | 17 | 0.12 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HB | 17 | 0.12 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HB | 17 | 0.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 1 | 0.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 1 | 0.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 1 | 0.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 1 | 0.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 1 | 0.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 1 | 0.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 1 | 0.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 1 | 0.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 1 | 0.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 20 | 0.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 20 | 0.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 20 | 0.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 20 | 0.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 20 | 0.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 20 | 0.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 20 | 0.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 20 | 0.12 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 20 | 0.12 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG11 | 10 | 0.12 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG12 | 10 | 0.12 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG13 | 10 | 0.12 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG21 | 10 | 0.12 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG22 | 10 | 0.12 |
| (1,2102) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:17:VAL:HG23 | 10 | 0.12 |
| (1,2074) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 4 | 0.12 |
| (1,2074) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 4 | 0.12 |
| (1,2074) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 4 | 0.12 |
| (1,2030) | 1:A:159:GLN:HA | 1:A:159:GLN:HG3 | 12 | 0.12 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG21 | 8 | 0.12 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG22 | 8 | 0.12 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG23 | 8 | 0.12 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE21 | 19 | 0.12 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE21 | 19 | 0.12 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE21 | 19 | 0.12 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG11 | 1:A:102:GLN:HE22 | 19 | 0.12 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG12 | 1:A:102:GLN:HE22 | 19 | 0.12 |
| (1,1948) | 1:A:85:VAL:HG13 | 1:A:102:GLN:HE22 | 19 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG21 | 12 | 0.12 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG22 | 12 | 0.12 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD21 | 1:A:99:VAL:HG23 | 12 | 0.12 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG21 | 12 | 0.12 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG22 | 12 | 0.12 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD22 | 1:A:99:VAL:HG23 | 12 | 0.12 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG21 | 12 | 0.12 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG22 | 12 | 0.12 |
| (1,1901) | 1:A:88:LEU:HD23 | 1:A:99:VAL:HG23 | 12 | 0.12 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG21 | 1:A:65:VAL:H | 1 | 0.12 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG22 | 1:A:65:VAL:H | 1 | 0.12 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG23 | 1:A:65:VAL:H | 1 | 0.12 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG21 | 1:A:65:VAL:H | 14 | 0.12 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG22 | 1:A:65:VAL:H | 14 | 0.12 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG23 | 1:A:65:VAL:H | 14 | 0.12 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG21 | 1:A:65:VAL:H | 17 | 0.12 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG22 | 1:A:65:VAL:H | 17 | 0.12 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG23 | 1:A:65:VAL:H | 17 | 0.12 |
| (1,1836) | 1:A:28:VAL:HG21 | 1:A:29:ASP:H | 2 | 0.12 |
| (1,1836) | 1:A:28:VAL:HG22 | 1:A:29:ASP:H | 2 | 0.12 |
| (1,1836) | 1:A:28:VAL:HG23 | 1:A:29:ASP:H | 2 | 0.12 |
| (1,1836) | 1:A:28:VAL:HG21 | 1:A:29:ASP:H | 16 | 0.12 |
| (1,1836) | 1:A:28:VAL:HG22 | 1:A:29:ASP:H | 16 | 0.12 |
| (1,1836) | 1:A:28:VAL:HG23 | 1:A:29:ASP:H | 16 | 0.12 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 6 | 0.12 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 6 | 0.12 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 6 | 0.12 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 7 | 0.12 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 7 | 0.12 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 7 | 0.12 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 12 | 0.12 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 12 | 0.12 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 12 | 0.12 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 15 | 0.12 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 15 | 0.12 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 15 | 0.12 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 19 | 0.12 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 19 | 0.12 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 19 | 0.12 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:H | 11 | 0.12 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:H | 11 | 0.12 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:H | 11 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,1804) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG21 | 3 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG22 | 3 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG23 | 3 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG21 | 3 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG22 | 3 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG23 | 3 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 3 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 3 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 3 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG21 | 6 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG22 | 6 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG23 | 6 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG21 | 6 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG22 | 6 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG23 | 6 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 6 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 6 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 6 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG21 | 11 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG22 | 11 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG23 | 11 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG21 | 11 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG22 | 11 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG23 | 11 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 11 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 11 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 11 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG21 | 15 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG22 | 15 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB1 | 1:A:65:VAL:HG23 | 15 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG21 | 15 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG22 | 15 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB2 | 1:A:65:VAL:HG23 | 15 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG21 | 15 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG22 | 15 | 0.12 |
| (1,1802) | 1:A:20:ALA:HB3 | 1:A:65:VAL:HG23 | 15 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE1 | 4 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE2 | 4 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE1 | 4 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE2 | 4 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE1 | 4 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE2 | 4 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE1 | 5 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE2 | 5 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE1 | 5 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE2 | 5 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE1 | 5 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE2 | 5 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE1 | 10 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE2 | 10 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE1 | 10 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE2 | 10 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE1 | 10 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE2 | 10 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE1 | 11 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE2 | 11 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE1 | 11 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE2 | 11 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE1 | 11 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE2 | 11 | 0.12 |
| (1,1697) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:72:ALA:HA | 10 | 0.12 |
| (1,1697) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:72:ALA:HA | 10 | 0.12 |
| (1,1697) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:72:ALA:HA | 10 | 0.12 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB1 | 1:A:169:THR:HG21 | 17 | 0.12 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB1 | 1:A:169:THR:HG22 | 17 | 0.12 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB1 | 1:A:169:THR:HG23 | 17 | 0.12 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB2 | 1:A:169:THR:HG21 | 17 | 0.12 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB2 | 1:A:169:THR:HG22 | 17 | 0.12 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB2 | 1:A:169:THR:HG23 | 17 | 0.12 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 17 | 0.12 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 17 | 0.12 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 17 | 0.12 |
| (1,1618) | 1:A:112:THR:HG21 | 1:A:114:ASP:HB3 | 9 | 0.12 |
| (1,1618) | 1:A:112:THR:HG22 | 1:A:114:ASP:HB3 | 9 | 0.12 |
| (1,1618) | 1:A:112:THR:HG23 | 1:A:114:ASP:HB3 | 9 | 0.12 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD11 | 14 | 0.12 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD12 | 14 | 0.12 |
| (1,1567) | 1:A:102:GLN:HB3 | 1:A:104:LEU:HD13 | 14 | 0.12 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB1 | 3 | 0.12 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB3 | 3 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB1 | 3 | 0.12 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB1 | 3 | 0.12 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HA | 2 | 0.12 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HA | 2 | 0.12 |
| (1,1476) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HA | 2 | 0.12 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 5 | 0.12 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 5 | 0.12 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 5 | 0.12 |
| (1,1452) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:122:THR:H | 2 | 0.12 |
| (1,1452) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:122:THR:H | 2 | 0.12 |
| (1,1452) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:122:THR:H | 2 | 0.12 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:182:VAL:HB | 7 | 0.12 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:182:VAL:HB | 7 | 0.12 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:182:VAL:HB | 7 | 0.12 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:145:PRO:HG2 | 4 | 0.12 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:145:PRO:HG2 | 4 | 0.12 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:145:PRO:HG2 | 4 | 0.12 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:145:PRO:HG2 | 12 | 0.12 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:145:PRO:HG2 | 12 | 0.12 |
| (1,1435) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:145:PRO:HG2 | 12 | 0.12 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:183:ASN:HB3 | 2 | 0.12 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:183:ASN:HB3 | 2 | 0.12 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:183:ASN:HB3 | 2 | 0.12 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG21 | 9 | 0.12 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG22 | 9 | 0.12 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG23 | 9 | 0.12 |
| (1,1393) | 1:A:48:THR:HA | 1:A:138:PHE:HB3 | 20 | 0.12 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HB1 | 15 | 0.12 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HB3 | 15 | 0.12 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HB1 | 15 | 0.12 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HB3 | 15 | 0.12 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HB1 | 15 | 0.12 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HB3 | 15 | 0.12 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 16 | 0.12 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 16 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 16 | 0.12 |
| (1,1238) | 1:A:35:GLY:H | 1:A:52:VAL:HG21 | 11 | 0.12 |
| (1,1238) | 1:A:35:GLY:H | 1:A:52:VAL:HG22 | 11 | 0.12 |
| (1,1238) | 1:A:35:GLY:H | 1:A:52:VAL:HG23 | 11 | 0.12 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:153:THR:H | 10 | 0.12 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:153:THR:H | 10 | 0.12 |
| (1,1071) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:153:THR:H | 10 | 0.12 |
| (1,1019) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:138:PHE:HB2 | 17 | 0.12 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG21 | 1:A:18:ASN:HD21 | 2 | 0.11 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG22 | 1:A:18:ASN:HD21 | 2 | 0.11 |
| (1,966) | 1:A:16:VAL:HG23 | 1:A:18:ASN:HD21 | 2 | 0.11 |
| (1,896) | 1:A:9:THR:H | 1:A:11:HIS:HA | 20 | 0.11 |
| (1,857) | 1:A:49:SER:H | 1:A:136:ARG:HD3 | 5 | 0.11 |
| (1,844) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:64:ASN:HD22 | 4 | 0.11 |
| (1,844) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:64:ASN:HD22 | 7 | 0.11 |
| (1,844) | 1:A:64:ASN:HB3 | 1:A:64:ASN:HD22 | 18 | 0.11 |
| (1,758) | 1:A:32:VAL:HG21 | 1:A:55:ASN:H | 10 | 0.11 |
| (1,758) | 1:A:32:VAL:HG22 | 1:A:55:ASN:H | 10 | 0.11 |
| (1,758) | 1:A:32:VAL:HG23 | 1:A:55:ASN:H | 10 | 0.11 |
| (1,750) | 1:A:133:PHE:HB2 | 1:A:134:GLN:H | 11 | 0.11 |
| (1,698) | 1:A:43:ALA:H | 1:A:143:ALA:HB1 | 3 | 0.11 |
| (1,698) | 1:A:43:ALA:H | 1:A:143:ALA:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,698) | 1:A:43:ALA:H | 1:A:143:ALA:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,698) | 1:A:43:ALA:H | 1:A:143:ALA:HB1 | 18 | 0.11 |
| (1,698) | 1:A:43:ALA:H | 1:A:143:ALA:HB2 | 18 | 0.11 |
| (1,698) | 1:A:43:ALA:H | 1:A:143:ALA:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,686) | 1:A:115:GLY:HA3 | 1:A:117:THR:H | 9 | 0.11 |
| (1,62) | 1:A:24:ASP:H | 1:A:27:SER:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,596) | 1:A:30:GLN:H | 1:A:30:GLN:HG3 | 20 | 0.11 |
| (1,582) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:101:VAL:H | 11 | 0.11 |
| (1,582) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:101:VAL:H | 11 | 0.11 |
| (1,582) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:101:VAL:H | 11 | 0.11 |
| (1,549) | 1:A:82:HIS:HB2 | 1:A:85:VAL:H | 2 | 0.11 |
| (1,462) | 1:A:116:ALA:H | 1:A:169:THR:HG21 | 5 | 0.11 |
| (1,462) | 1:A:116:ALA:H | 1:A:169:THR:HG22 | 5 | 0.11 |
| (1,462) | 1:A:116:ALA:H | 1:A:169:THR:HG23 | 5 | 0.11 |
| (1,462) | 1:A:116:ALA:H | 1:A:169:THR:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,462) | 1:A:116:ALA:H | 1:A:169:THR:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,462) | 1:A:116:ALA:H | 1:A:169:THR:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,3986) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:137:TYR:HE1 | 1 | 0.11 |
| (1,3986) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:137:TYR:HE2 | 1 | 0.11 |
| (1,3986) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:137:TYR:HE1 | 4 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,3986) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:137:TYR:HE2 | 4 | 0.11 |
| (1,3986) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:137:TYR:HE1 | 5 | 0.11 |
| (1,3986) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:137:TYR:HE2 | 5 | 0.11 |
| (1,3986) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:137:TYR:HE1 | 11 | 0.11 |
| (1,3986) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:137:TYR:HE2 | 11 | 0.11 |
| (1,3986) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:137:TYR:HE1 | 15 | 0.11 |
| (1,3986) | 1:A:34:LEU:H | 1:A:137:TYR:HE2 | 15 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG21 | 1:A:82:HIS:HD2 | 2 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG22 | 1:A:82:HIS:HD2 | 2 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG23 | 1:A:82:HIS:HD2 | 2 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG21 | 1:A:82:HIS:HD2 | 4 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG22 | 1:A:82:HIS:HD2 | 4 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG23 | 1:A:82:HIS:HD2 | 4 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG21 | 1:A:82:HIS:HD2 | 5 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG22 | 1:A:82:HIS:HD2 | 5 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG23 | 1:A:82:HIS:HD2 | 5 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG21 | 1:A:82:HIS:HD2 | 6 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG22 | 1:A:82:HIS:HD2 | 6 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG23 | 1:A:82:HIS:HD2 | 6 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG21 | 1:A:82:HIS:HD2 | 7 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG22 | 1:A:82:HIS:HD2 | 7 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG23 | 1:A:82:HIS:HD2 | 7 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG21 | 1:A:82:HIS:HD2 | 8 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG22 | 1:A:82:HIS:HD2 | 8 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG23 | 1:A:82:HIS:HD2 | 8 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG21 | 1:A:82:HIS:HD2 | 9 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG22 | 1:A:82:HIS:HD2 | 9 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG23 | 1:A:82:HIS:HD2 | 9 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG21 | 1:A:82:HIS:HD2 | 10 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG22 | 1:A:82:HIS:HD2 | 10 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG23 | 1:A:82:HIS:HD2 | 10 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG21 | 1:A:82:HIS:HD2 | 13 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG22 | 1:A:82:HIS:HD2 | 13 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG23 | 1:A:82:HIS:HD2 | 13 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG21 | 1:A:82:HIS:HD2 | 14 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG22 | 1:A:82:HIS:HD2 | 14 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG23 | 1:A:82:HIS:HD2 | 14 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG21 | 1:A:82:HIS:HD2 | 15 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG22 | 1:A:82:HIS:HD2 | 15 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG23 | 1:A:82:HIS:HD2 | 15 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG21 | 1:A:82:HIS:HD2 | 17 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG22 | 1:A:82:HIS:HD2 | 17 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG23 | 1:A:82:HIS:HD2 | 17 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG21 | 1:A:82:HIS:HD2 | 18 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG22 | 1:A:82:HIS:HD2 | 18 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG23 | 1:A:82:HIS:HD2 | 18 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG21 | 1:A:82:HIS:HD2 | 20 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG22 | 1:A:82:HIS:HD2 | 20 | 0.11 |
| (1,3974) | 1:A:78:ILE:HG23 | 1:A:82:HIS:HD2 | 20 | 0.11 |
| (1,3964) | 1:A:174:THR:HG21 | 1:A:176:HIS:HD2 | 3 | 0.11 |
| (1,3964) | 1:A:174:THR:HG22 | 1:A:176:HIS:HD2 | 3 | 0.11 |
| (1,3964) | 1:A:174:THR:HG23 | 1:A:176:HIS:HD2 | 3 | 0.11 |
| (1,3964) | 1:A:174:THR:HG21 | 1:A:176:HIS:HD2 | 17 | 0.11 |
| (1,3964) | 1:A:174:THR:HG22 | 1:A:176:HIS:HD2 | 17 | 0.11 |
| (1,3964) | 1:A:174:THR:HG23 | 1:A:176:HIS:HD2 | 17 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG21 | 1:A:176:HIS:HD2 | 2 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG22 | 1:A:176:HIS:HD2 | 2 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG23 | 1:A:176:HIS:HD2 | 2 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG21 | 1:A:176:HIS:HD2 | 3 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG22 | 1:A:176:HIS:HD2 | 3 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG23 | 1:A:176:HIS:HD2 | 3 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG21 | 1:A:176:HIS:HD2 | 4 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG22 | 1:A:176:HIS:HD2 | 4 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG23 | 1:A:176:HIS:HD2 | 4 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG21 | 1:A:176:HIS:HD2 | 7 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG22 | 1:A:176:HIS:HD2 | 7 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG23 | 1:A:176:HIS:HD2 | 7 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG21 | 1:A:176:HIS:HD2 | 9 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG22 | 1:A:176:HIS:HD2 | 9 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG23 | 1:A:176:HIS:HD2 | 9 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG21 | 1:A:176:HIS:HD2 | 10 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG22 | 1:A:176:HIS:HD2 | 10 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG23 | 1:A:176:HIS:HD2 | 10 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG21 | 1:A:176:HIS:HD2 | 11 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG22 | 1:A:176:HIS:HD2 | 11 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG23 | 1:A:176:HIS:HD2 | 11 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG21 | 1:A:176:HIS:HD2 | 14 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG22 | 1:A:176:HIS:HD2 | 14 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG23 | 1:A:176:HIS:HD2 | 14 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG21 | 1:A:176:HIS:HD2 | 16 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG22 | 1:A:176:HIS:HD2 | 16 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG23 | 1:A:176:HIS:HD2 | 16 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG21 | 1:A:176:HIS:HD2 | 18 | 0.11 |
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG22 | 1:A:176:HIS:HD2 | 18 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3963) | 1:A:31:THR:HG23 | 1:A:176:HIS:HD2 | 18 | 0.11 |
| (1,3947) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HZ | 2 | 0.11 |
| (1,3947) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HZ | 4 | 0.11 |
| (1,3947) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HZ | 8 | 0.11 |
| (1,3947) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HZ | 9 | 0.11 |
| (1,3947) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HZ | 10 | 0.11 |
| (1,3947) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HZ | 11 | 0.11 |
| (1,3947) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HZ | 19 | 0.11 |
| (1,3927) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:152:ALA:HB1 | 9 | 0.11 |
| (1,3927) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:152:ALA:HB2 | 9 | 0.11 |
| (1,3927) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:152:ALA:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,3927) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:152:ALA:HB1 | 9 | 0.11 |
| (1,3927) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:152:ALA:HB2 | 9 | 0.11 |
| (1,3927) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:152:ALA:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,3919) | 1:A:45:GLU:HG2 | 1:A:138:PHE:HE1 | 2 | 0.11 |
| (1,3919) | 1:A:45:GLU:HG2 | 1:A:138:PHE:HE2 | 2 | 0.11 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:73:PHE:HE1 | 4 | 0.11 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:73:PHE:HE2 | 4 | 0.11 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:73:PHE:HE1 | 4 | 0.11 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:73:PHE:HE2 | 4 | 0.11 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:73:PHE:HE1 | 4 | 0.11 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:73:PHE:HE2 | 4 | 0.11 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:73:PHE:HE1 | 11 | 0.11 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:73:PHE:HE2 | 11 | 0.11 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:73:PHE:HE1 | 11 | 0.11 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:73:PHE:HE2 | 11 | 0.11 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:73:PHE:HE1 | 11 | 0.11 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:73:PHE:HE2 | 11 | 0.11 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:73:PHE:HE1 | 12 | 0.11 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:73:PHE:HE2 | 12 | 0.11 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:73:PHE:HE1 | 12 | 0.11 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:73:PHE:HE2 | 12 | 0.11 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:73:PHE:HE1 | 12 | 0.11 |
| (1,3917) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:73:PHE:HE2 | 12 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD11 | 2 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD12 | 2 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD13 | 2 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD11 | 2 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD12 | 2 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD13 | 2 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD11 | 4 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD12 | 4 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD13 | 4 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD11 | 4 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD12 | 4 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD13 | 4 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD11 | 10 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD12 | 10 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD13 | 10 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD11 | 10 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD12 | 10 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD13 | 10 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD11 | 11 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD12 | 11 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD13 | 11 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD11 | 11 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD12 | 11 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD13 | 11 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD11 | 17 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD12 | 17 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE1 | 1:A:103:ILE:HD13 | 17 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD11 | 17 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD12 | 17 | 0.11 |
| (1,3916) | 1:A:73:PHE:HE2 | 1:A:103:ILE:HD13 | 17 | 0.11 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE1 | 4 | 0.11 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE2 | 4 | 0.11 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE1 | 9 | 0.11 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE2 | 9 | 0.11 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE1 | 10 | 0.11 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE2 | 10 | 0.11 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE1 | 17 | 0.11 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE2 | 17 | 0.11 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE1 | 19 | 0.11 |
| (1,3905) | 1:A:71:VAL:HB | 1:A:133:PHE:HE2 | 19 | 0.11 |
| (1,3904) | 1:A:56:ILE:HB | 1:A:133:PHE:HE1 | 15 | 0.11 |
| (1,3904) | 1:A:56:ILE:HB | 1:A:133:PHE:HE2 | 15 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:177:PHE:HD1 | 4 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:177:PHE:HD2 | 4 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:177:PHE:HD1 | 4 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:177:PHE:HD2 | 4 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:177:PHE:HD1 | 4 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:177:PHE:HD2 | 4 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:177:PHE:HD1 | 5 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:177:PHE:HD2 | 5 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:177:PHE:HD1 | 5 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:177:PHE:HD2 | 5 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:177:PHE:HD1 | 5 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:177:PHE:HD2 | 5 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:177:PHE:HD1 | 7 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:177:PHE:HD2 | 7 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:177:PHE:HD1 | 7 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:177:PHE:HD2 | 7 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:177:PHE:HD1 | 7 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:177:PHE:HD2 | 7 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:177:PHE:HD1 | 9 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB1 | 1:A:177:PHE:HD2 | 9 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:177:PHE:HD1 | 9 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB2 | 1:A:177:PHE:HD2 | 9 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:177:PHE:HD1 | 9 | 0.11 |
| (1,3896) | 1:A:135:ALA:HB3 | 1:A:177:PHE:HD2 | 9 | 0.11 |
| (1,3887) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:177:PHE:HD1 | 9 | 0.11 |
| (1,3887) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:177:PHE:HD2 | 9 | 0.11 |
| (1,3887) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:177:PHE:HD1 | 9 | 0.11 |
| (1,3887) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:177:PHE:HD2 | 9 | 0.11 |
| (1,3887) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:177:PHE:HD1 | 9 | 0.11 |
| (1,3887) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:177:PHE:HD2 | 9 | 0.11 |
| (1,3885) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:177:PHE:HD1 | 8 | 0.11 |
| (1,3885) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:177:PHE:HD2 | 8 | 0.11 |
| (1,3885) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:177:PHE:HD1 | 15 | 0.11 |
| (1,3885) | 1:A:32:VAL:H | 1:A:177:PHE:HD2 | 15 | 0.11 |
| (1,3883) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:177:PHE:HD1 | 9 | 0.11 |
| (1,3883) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:177:PHE:HD2 | 9 | 0.11 |
| (1,3883) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:177:PHE:HD1 | 9 | 0.11 |
| (1,3883) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:177:PHE:HD2 | 9 | 0.11 |
| (1,3883) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:177:PHE:HD1 | 9 | 0.11 |
| (1,3883) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:177:PHE:HD2 | 9 | 0.11 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 3 | 0.11 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 3 | 0.11 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 3 | 0.11 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 3 | 0.11 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 3 | 0.11 |
| (1,3879) | 1:A:34:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 3 | 0.11 |
| (1,3876) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:137:TYR:HD1 | 15 | 0.11 |
| (1,3876) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:137:TYR:HD2 | 15 | 0.11 |
| (1,3873) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD1 | 12 | 0.11 |
| (1,3873) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HD2 | 12 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,3873) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD1 | 12 | 0.11 |
| (1,3873) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HD2 | 12 | 0.11 |
| (1,3873) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD1 | 12 | 0.11 |
| (1,3873) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HD2 | 12 | 0.11 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD1 | 14 | 0.11 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG11 | 1:A:12:PHE:HD2 | 14 | 0.11 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD1 | 14 | 0.11 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG12 | 1:A:12:PHE:HD2 | 14 | 0.11 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD1 | 14 | 0.11 |
| (1,3866) | 1:A:10:VAL:HG13 | 1:A:12:PHE:HD2 | 14 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 1 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 1 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 1 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 1 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 1 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 1 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 14 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 14 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 14 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 14 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 14 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 14 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 15 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 15 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 15 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 15 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 15 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 15 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 16 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 16 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 16 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 16 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 16 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 16 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 18 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 18 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 18 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 18 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 18 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 18 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD1 | 20 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG11 | 1:A:133:PHE:HD2 | 20 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD1 | 20 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG12 | 1:A:133:PHE:HD2 | 20 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD1 | 20 | 0.11 |
| (1,3862) | 1:A:71:VAL:HG13 | 1:A:133:PHE:HD2 | 20 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 5 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 5 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 5 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD21 | 5 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD22 | 5 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD23 | 5 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 5 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 5 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 5 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD21 | 5 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD22 | 5 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD23 | 5 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 6 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 6 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 6 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD21 | 6 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD22 | 6 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD23 | 6 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 6 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 6 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 6 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD21 | 6 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD22 | 6 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD23 | 6 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 15 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 15 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 15 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD21 | 15 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD22 | 15 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD23 | 15 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 15 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 15 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 15 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD21 | 15 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD22 | 15 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD23 | 15 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD11 | 17 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD12 | 17 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD13 | 17 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD21 | 17 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD22 | 17 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD1 | 1:A:113:LEU:HD23 | 17 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD11 | 17 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD12 | 17 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD13 | 17 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD21 | 17 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD22 | 17 | 0.11 |
| (1,3853) | 1:A:73:PHE:HD2 | 1:A:113:LEU:HD23 | 17 | 0.11 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG11 | 11 | 0.11 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG12 | 11 | 0.11 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD1 | 1:A:156:VAL:HG13 | 11 | 0.11 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG11 | 11 | 0.11 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG12 | 11 | 0.11 |
| (1,3839) | 1:A:154:PHE:HD2 | 1:A:156:VAL:HG13 | 11 | 0.11 |
| (1,3823) | 1:A:54:PHE:HD1 | 1:A:134:GLN:HA | 15 | 0.11 |
| (1,3823) | 1:A:54:PHE:HD2 | 1:A:134:GLN:HA | 15 | 0.11 |
| (1,3809) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:168:THR:HG21 | 10 | 0.11 |
| (1,3809) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:168:THR:HG22 | 10 | 0.11 |
| (1,3809) | 1:A:158:TYR:HD1 | 1:A:168:THR:HG23 | 10 | 0.11 |
| (1,3809) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:168:THR:HG21 | 10 | 0.11 |
| (1,3809) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:168:THR:HG22 | 10 | 0.11 |
| (1,3809) | 1:A:158:TYR:HD2 | 1:A:168:THR:HG23 | 10 | 0.11 |
| (1,3800) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:114:ASP:HB3 | 10 | 0.11 |
| (1,3800) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:114:ASP:HB3 | 10 | 0.11 |
| (1,3800) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:114:ASP:HB3 | 10 | 0.11 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:H | 7 | 0.11 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:H | 7 | 0.11 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:H | 7 | 0.11 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD11 | 1:A:153:THR:H | 11 | 0.11 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD12 | 1:A:153:THR:H | 11 | 0.11 |
| (1,3781) | 1:A:74:LEU:HD13 | 1:A:153:THR:H | 11 | 0.11 |
| (1,3729) | 1:A:123:THR:HA | 1:A:124:LEU:HG | 18 | 0.11 |
| (1,3638) | 1:A:145:PRO:HG2 | 1:A:182:VAL:HA | 9 | 0.11 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 3 | 0.11 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 3 | 0.11 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 3 | 0.11 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 3 | 0.11 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 3 | 0.11 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 3 | 0.11 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD1 | 15 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD21 | 1:A:137:TYR:HD2 | 15 | 0.11 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD1 | 15 | 0.11 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD22 | 1:A:137:TYR:HD2 | 15 | 0.11 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD1 | 15 | 0.11 |
| (1,3593) | 1:A:42:LEU:HD23 | 1:A:137:TYR:HD2 | 15 | 0.11 |
| (1,3540) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 5 | 0.11 |
| (1,3540) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:47:ALA:H | 20 | 0.11 |
| (1,3354) | 1:A:44:GLN:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 7 | 0.11 |
| (1,3278) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:143:ALA:HB1 | 15 | 0.11 |
| (1,3278) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:143:ALA:HB2 | 15 | 0.11 |
| (1,3278) | 1:A:39:THR:HB | 1:A:143:ALA:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,3219) | 1:A:36:GLN:HG3 | 1:A:180:GLU:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,3219) | 1:A:36:GLN:HG2 | 1:A:180:GLU:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG21 | 2 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG22 | 2 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG23 | 2 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG23 | 3 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG21 | 12 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG22 | 12 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG23 | 12 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG21 | 13 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG22 | 13 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG23 | 13 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG21 | 14 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG22 | 14 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG23 | 14 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG21 | 15 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG22 | 15 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG23 | 15 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG21 | 16 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG22 | 16 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG23 | 16 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG21 | 18 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG22 | 18 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG23 | 18 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG21 | 19 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG22 | 19 | 0.11 |
| (1,3192) | 1:A:37:VAL:HB | 1:A:39:THR:HG23 | 19 | 0.11 |
| (1,3184) | 1:A:52:VAL:H | 1:A:52:VAL:HB | 19 | 0.11 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:101:VAL:HB | 3 | 0.11 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:101:VAL:HB | 3 | 0.11 |
| (1,3172) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:101:VAL:HB | 3 | 0.11 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:134:GLN:HB2 | 4 | 0.11 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:134:GLN:HB2 | 4 | 0.11 |
| (1,3169) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:134:GLN:HB2 | 4 | 0.11 |
| (1,3085) | 1:A:4:THR:HB | 1:A:5:VAL:HG11 | 15 | 0.11 |
| (1,3085) | 1:A:4:THR:HB | 1:A:5:VAL:HG12 | 15 | 0.11 |
| (1,3085) | 1:A:4:THR:HB | 1:A:5:VAL:HG13 | 15 | 0.11 |
| (1,3085) | 1:A:4:THR:HB | 1:A:5:VAL:HG21 | 15 | 0.11 |
| (1,3085) | 1:A:4:THR:HB | 1:A:5:VAL:HG22 | 15 | 0.11 |
| (1,3085) | 1:A:4:THR:HB | 1:A:5:VAL:HG23 | 15 | 0.11 |
| (1,2923) | 1:A:61:CYS:HB2 | 1:A:62:ASP:H | 14 | 0.11 |
| (1,2891) | 1:A:68:LYS:HE2 | 1:A:159:GLN:HA | 7 | 0.11 |
| (1,2891) | 1:A:68:LYS:HE3 | 1:A:159:GLN:HA | 7 | 0.11 |
| (1,2889) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:155:LYS:HE2 | 10 | 0.11 |
| (1,2889) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:155:LYS:HE2 | 10 | 0.11 |
| (1,2889) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:155:LYS:HE2 | 10 | 0.11 |
| (1,2884) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:155:LYS:HE3 | 14 | 0.11 |
| (1,2884) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:155:LYS:HE3 | 14 | 0.11 |
| (1,2884) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:155:LYS:HE3 | 14 | 0.11 |
| (1,2876) | 1:A:31:THR:HG21 | 1:A:178:LYS:HE2 | 19 | 0.11 |
| (1,2876) | 1:A:31:THR:HG22 | 1:A:178:LYS:HE2 | 19 | 0.11 |
| (1,2876) | 1:A:31:THR:HG23 | 1:A:178:LYS:HE2 | 19 | 0.11 |
| (1,2849) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:56:ILE:H | 6 | 0.11 |
| (1,2843) | 1:A:55:ASN:H | 1:A:55:ASN:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG11 | 1:A:38:ARG:HD2 | 2 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG11 | 1:A:38:ARG:HD3 | 2 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG12 | 1:A:38:ARG:HD2 | 2 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG12 | 1:A:38:ARG:HD3 | 2 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG13 | 1:A:38:ARG:HD2 | 2 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG13 | 1:A:38:ARG:HD3 | 2 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG21 | 1:A:38:ARG:HD2 | 2 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG21 | 1:A:38:ARG:HD3 | 2 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG22 | 1:A:38:ARG:HD2 | 2 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG22 | 1:A:38:ARG:HD3 | 2 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG23 | 1:A:38:ARG:HD2 | 2 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG23 | 1:A:38:ARG:HD3 | 2 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG11 | 1:A:38:ARG:HD2 | 5 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG11 | 1:A:38:ARG:HD3 | 5 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG12 | 1:A:38:ARG:HD2 | 5 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG12 | 1:A:38:ARG:HD3 | 5 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG13 | 1:A:38:ARG:HD2 | 5 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG13 | 1:A:38:ARG:HD3 | 5 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG21 | 1:A:38:ARG:HD2 | 5 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG21 | 1:A:38:ARG:HD3 | 5 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG22 | 1:A:38:ARG:HD2 | 5 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG22 | 1:A:38:ARG:HD3 | 5 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG23 | 1:A:38:ARG:HD2 | 5 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG23 | 1:A:38:ARG:HD3 | 5 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG11 | 1:A:38:ARG:HD2 | 6 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG11 | 1:A:38:ARG:HD3 | 6 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG12 | 1:A:38:ARG:HD2 | 6 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG12 | 1:A:38:ARG:HD3 | 6 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG13 | 1:A:38:ARG:HD2 | 6 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG13 | 1:A:38:ARG:HD3 | 6 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG21 | 1:A:38:ARG:HD2 | 6 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG21 | 1:A:38:ARG:HD3 | 6 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG22 | 1:A:38:ARG:HD2 | 6 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG22 | 1:A:38:ARG:HD3 | 6 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG23 | 1:A:38:ARG:HD2 | 6 | 0.11 |
| (1,2833) | 1:A:37:VAL:HG23 | 1:A:38:ARG:HD3 | 6 | 0.11 |
| (1,283) | 1:A:109:ALA:HB1 | 1:A:110:ALA:H | 5 | 0.11 |
| (1,283) | 1:A:109:ALA:HB2 | 1:A:110:ALA:H | 5 | 0.11 |
| (1,283) | 1:A:109:ALA:HB3 | 1:A:110:ALA:H | 5 | 0.11 |
| (1,2743) | 1:A:74:LEU:HG | 1:A:75:GLY:HA3 | 10 | 0.11 |
| (1,2683) | 1:A:162:GLY:HA2 | 1:A:163:GLY:H | 18 | 0.11 |
| (1,2655) | 1:A:130:THR:HA | 1:A:131:ILE:HD11 | 16 | 0.11 |
| (1,2655) | 1:A:130:THR:HA | 1:A:131:ILE:HD12 | 16 | 0.11 |
| (1,2655) | 1:A:130:THR:HA | 1:A:131:ILE:HD13 | 16 | 0.11 |
| (1,2644) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:103:ILE:HD11 | 20 | 0.11 |
| (1,2644) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:103:ILE:HD12 | 20 | 0.11 |
| (1,2644) | 1:A:54:PHE:HZ | 1:A:103:ILE:HD13 | 20 | 0.11 |
| (1,2625) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:82:HIS:HD2 | 12 | 0.11 |
| (1,2625) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:82:HIS:HD2 | 12 | 0.11 |
| (1,2625) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:82:HIS:HD2 | 12 | 0.11 |
| (1,2624) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:72:ALA:HA | 3 | 0.11 |
| (1,2624) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:72:ALA:HA | 3 | 0.11 |
| (1,2624) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:72:ALA:HA | 3 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2624) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:72:ALA:HA | 5 | 0.11 |
| (1,2624) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:72:ALA:HA | 5 | 0.11 |
| (1,2624) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:72:ALA:HA | 5 | 0.11 |
| (1,2624) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:72:ALA:HA | 11 | 0.11 |
| (1,2624) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:72:ALA:HA | 11 | 0.11 |
| (1,2624) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:72:ALA:HA | 11 | 0.11 |
| (1,2624) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:72:ALA:HA | 17 | 0.11 |
| (1,2624) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:72:ALA:HA | 17 | 0.11 |
| (1,2624) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:72:ALA:HA | 17 | 0.11 |
| (1,262) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:58:LEU:HD21 | 3 | 0.11 |
| (1,262) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:58:LEU:HD22 | 3 | 0.11 |
| (1,262) | 1:A:23:VAL:H | 1:A:58:LEU:HD23 | 3 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG21 | 2 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG22 | 2 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG23 | 2 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG23 | 3 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG21 | 5 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG22 | 5 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG23 | 5 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG21 | 10 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG22 | 10 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG23 | 10 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG21 | 14 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG22 | 14 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG23 | 14 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG21 | 18 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG22 | 18 | 0.11 |
| (1,2614) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:103:ILE:HG23 | 18 | 0.11 |
| (1,2572) | 1:A:125:ASN:HA | 1:A:129:ASN:HD22 | 3 | 0.11 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB1 | 4 | 0.11 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB2 | 4 | 0.11 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB1 | 5 | 0.11 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB1 | 7 | 0.11 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB3 | 7 | 0.11 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB1 | 8 | 0.11 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB2 | 8 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB1 | 12 | 0.11 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB2 | 12 | 0.11 |
| (1,2468) | 1:A:166:ALA:HA | 1:A:167:ALA:HB3 | 12 | 0.11 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG11 | 18 | 0.11 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG12 | 18 | 0.11 |
| (1,2409) | 1:A:37:VAL:H | 1:A:182:VAL:HG13 | 18 | 0.11 |
| (1,2391) | 1:A:92:ALA:HB1 | 1:A:93:ALA:HA | 18 | 0.11 |
| (1,2391) | 1:A:92:ALA:HB2 | 1:A:93:ALA:HA | 18 | 0.11 |
| (1,2391) | 1:A:92:ALA:HB3 | 1:A:93:ALA:HA | 18 | 0.11 |
| (1,2372) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:131:ILE:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,2372) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:131:ILE:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,2372) | 1:A:56:ILE:HD11 | 1:A:131:ILE:HG23 | 3 | 0.11 |
| (1,2372) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:131:ILE:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,2372) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:131:ILE:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,2372) | 1:A:56:ILE:HD12 | 1:A:131:ILE:HG23 | 3 | 0.11 |
| (1,2372) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:131:ILE:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,2372) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:131:ILE:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,2372) | 1:A:56:ILE:HD13 | 1:A:131:ILE:HG23 | 3 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG23 | 3 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG23 | 3 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG23 | 3 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG21 | 16 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG22 | 16 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB1 | 1:A:83:THR:HG23 | 16 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG21 | 16 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG22 | 16 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB2 | 1:A:83:THR:HG23 | 16 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG21 | 16 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG22 | 16 | 0.11 |
| (1,2369) | 1:A:80:ALA:HB3 | 1:A:83:THR:HG23 | 16 | 0.11 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG21 | 10 | 0.11 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG22 | 10 | 0.11 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG21 | 1:A:131:ILE:HG23 | 10 | 0.11 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG21 | 10 | 0.11 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG22 | 10 | 0.11 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG22 | 1:A:131:ILE:HG23 | 10 | 0.11 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG21 | 10 | 0.11 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG22 | 10 | 0.11 |
| (1,2368) | 1:A:71:VAL:HG23 | 1:A:131:ILE:HG23 | 10 | 0.11 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG21 | 20 | 0.11 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG22 | 20 | 0.11 |
| (1,2363) | 1:A:120:SER:HB2 | 1:A:131:ILE:HG23 | 20 | 0.11 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG11 | 1:A:171:ASN:HA | 17 | 0.11 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG12 | 1:A:171:ASN:HA | 17 | 0.11 |
| (1,2334) | 1:A:170:VAL:HG13 | 1:A:171:ASN:HA | 17 | 0.11 |
| (1,2330) | 1:A:169:THR:HA | 1:A:170:VAL:HG11 | 8 | 0.11 |
| (1,2330) | 1:A:169:THR:HA | 1:A:170:VAL:HG12 | 8 | 0.11 |
| (1,2330) | 1:A:169:THR:HA | 1:A:170:VAL:HG13 | 8 | 0.11 |
| (1,2317) | 1:A:44:GLN:HA | 1:A:141:GLY:HA3 | 1 | 0.11 |
| (1,2272) | 1:A:166:ALA:HB1 | 1:A:167:ALA:H | 1 | 0.11 |
| (1,2272) | 1:A:166:ALA:HB2 | 1:A:167:ALA:H | 1 | 0.11 |
| (1,2272) | 1:A:166:ALA:HB3 | 1:A:167:ALA:H | 1 | 0.11 |
| (1,2266) | 1:A:47:ALA:HB1 | 1:A:49:SER:H | 16 | 0.11 |
| (1,2266) | 1:A:47:ALA:HB2 | 1:A:49:SER:H | 16 | 0.11 |
| (1,2266) | 1:A:47:ALA:HB3 | 1:A:49:SER:H | 16 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB1 | 1 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB1 | 1 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB1 | 1 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB1 | 3 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB1 | 3 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB1 | 3 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB1 | 4 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB2 | 4 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB1 | 4 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB2 | 4 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB1 | 4 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB2 | 4 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB1 | 6 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB2 | 6 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB1 | 6 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB2 | 6 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB1 | 6 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB2 | 6 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB1 | 13 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB2 | 13 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB1 | 13 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB2 | 13 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB1 | 13 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB2 | 13 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB1 | 15 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB2 | 15 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB1 | 15 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB2 | 15 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB1 | 15 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB2 | 15 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB1 | 16 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB1 | 16 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB1 | 16 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB1 | 17 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB3 | 17 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB1 | 17 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB3 | 17 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB1 | 17 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB3 | 17 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB1 | 20 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD11 | 1:A:87:ALA:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB1 | 20 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD12 | 1:A:87:ALA:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB1 | 20 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,2244) | 1:A:78:ILE:HD13 | 1:A:87:ALA:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB1 | 1 | 0.11 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB1 | 3 | 0.11 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB1 | 13 | 0.11 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB2 | 13 | 0.11 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB1 | 17 | 0.11 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,2210) | 1:A:50:SER:HA | 1:A:51:ALA:HB3 | 17 | 0.11 |
| (1,2208) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:51:ALA:HB1 | 11 | 0.11 |
| (1,2208) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:51:ALA:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,2208) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:51:ALA:HB3 | 11 | 0.11 |
| (1,2208) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:51:ALA:HB1 | 15 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2208) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:51:ALA:HB2 | 15 | 0.11 |
| (1,2208) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:51:ALA:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,2208) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:51:ALA:HB1 | 18 | 0.11 |
| (1,2208) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:51:ALA:HB2 | 18 | 0.11 |
| (1,2208) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:51:ALA:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,2178) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:52:VAL:HB | 5 | 0.11 |
| (1,2178) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:52:VAL:HB | 5 | 0.11 |
| (1,2178) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:52:VAL:HB | 5 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HB | 4 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HB | 4 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HB | 4 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HB | 7 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HB | 7 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HB | 7 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HB | 10 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HB | 10 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HB | 10 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HB | 12 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HB | 12 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HB | 12 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HB | 14 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HB | 14 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HB | 14 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HB | 18 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HB | 18 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HB | 18 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HB | 19 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HB | 19 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HB | 19 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB1 | 1:A:156:VAL:HB | 20 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB2 | 1:A:156:VAL:HB | 20 | 0.11 |
| (1,2172) | 1:A:19:ALA:HB3 | 1:A:156:VAL:HB | 20 | 0.11 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG11 | 3 | 0.11 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG12 | 3 | 0.11 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG13 | 3 | 0.11 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,2135) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:17:VAL:HG23 | 3 | 0.11 |
| (1,2128) | 1:A:61:CYS:HB3 | 1:A:126:ASN:HA | 9 | 0.11 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG21 | 14 | 0.11 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG22 | 14 | 0.11 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:10:VAL:HG23 | 14 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG21 | 14 | 0.11 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG22 | 14 | 0.11 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:10:VAL:HG23 | 14 | 0.11 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG21 | 14 | 0.11 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG22 | 14 | 0.11 |
| (1,2107) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:10:VAL:HG23 | 14 | 0.11 |
| (1,2074) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:156:VAL:HG11 | 13 | 0.11 |
| (1,2074) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:156:VAL:HG12 | 13 | 0.11 |
| (1,2074) | 1:A:156:VAL:H | 1:A:156:VAL:HG13 | 13 | 0.11 |
| (1,2032) | 1:A:77:ALA:HB1 | 1:A:86:LEU:HA | 12 | 0.11 |
| (1,2032) | 1:A:77:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HA | 12 | 0.11 |
| (1,2032) | 1:A:77:ALA:HB3 | 1:A:86:LEU:HA | 12 | 0.11 |
| (1,2031) | 1:A:159:GLN:HA | 1:A:167:ALA:HB1 | 12 | 0.11 |
| (1,2031) | 1:A:159:GLN:HA | 1:A:167:ALA:HB2 | 12 | 0.11 |
| (1,2031) | 1:A:159:GLN:HA | 1:A:167:ALA:HB3 | 12 | 0.11 |
| (1,2023) | 1:A:68:LYS:HA | 1:A:124:LEU:HG | 9 | 0.11 |
| (1,2023) | 1:A:68:LYS:HA | 1:A:124:LEU:HG | 10 | 0.11 |
| (1,2023) | 1:A:68:LYS:HA | 1:A:124:LEU:HG | 13 | 0.11 |
| (1,2023) | 1:A:68:LYS:HA | 1:A:124:LEU:HG | 15 | 0.11 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 1 | 0.11 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 1 | 0.11 |
| (1,2001) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 1 | 0.11 |
| (1,1985) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE1 | 12 | 0.11 |
| (1,1985) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HE2 | 12 | 0.11 |
| (1,1985) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE1 | 12 | 0.11 |
| (1,1985) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HE2 | 12 | 0.11 |
| (1,1985) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE1 | 12 | 0.11 |
| (1,1985) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HE2 | 12 | 0.11 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG21 | 9 | 0.11 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG22 | 9 | 0.11 |
| (1,1982) | 1:A:151:ASP:HB3 | 1:A:174:THR:HG23 | 9 | 0.11 |
| (1,1915) | 1:A:18:ASN:HA | 1:A:168:THR:HG21 | 11 | 0.11 |
| (1,1915) | 1:A:18:ASN:HA | 1:A:168:THR:HG22 | 11 | 0.11 |
| (1,1915) | 1:A:18:ASN:HA | 1:A:168:THR:HG23 | 11 | 0.11 |
| (1,1907) | 1:A:117:THR:HG21 | 1:A:118:PHE:H | 6 | 0.11 |
| (1,1907) | 1:A:117:THR:HG22 | 1:A:118:PHE:H | 6 | 0.11 |
| (1,1907) | 1:A:117:THR:HG23 | 1:A:118:PHE:H | 6 | 0.11 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,1860) | 1:A:145:PRO:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG21 | 1:A:65:VAL:H | 5 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG22 | 1:A:65:VAL:H | 5 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG23 | 1:A:65:VAL:H | 5 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG21 | 1:A:65:VAL:H | 7 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG22 | 1:A:65:VAL:H | 7 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG23 | 1:A:65:VAL:H | 7 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG21 | 1:A:65:VAL:H | 8 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG22 | 1:A:65:VAL:H | 8 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG23 | 1:A:65:VAL:H | 8 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG21 | 1:A:65:VAL:H | 13 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG22 | 1:A:65:VAL:H | 13 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG23 | 1:A:65:VAL:H | 13 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG21 | 1:A:65:VAL:H | 15 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG22 | 1:A:65:VAL:H | 15 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG23 | 1:A:65:VAL:H | 15 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG21 | 1:A:65:VAL:H | 19 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG22 | 1:A:65:VAL:H | 19 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG23 | 1:A:65:VAL:H | 19 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG21 | 1:A:65:VAL:H | 20 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG22 | 1:A:65:VAL:H | 20 | 0.11 |
| (1,1848) | 1:A:63:THR:HG23 | 1:A:65:VAL:H | 20 | 0.11 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG11 | 1:A:174:THR:H | 12 | 0.11 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG12 | 1:A:174:THR:H | 12 | 0.11 |
| (1,1839) | 1:A:28:VAL:HG13 | 1:A:174:THR:H | 12 | 0.11 |
| (1,1836) | 1:A:28:VAL:HG21 | 1:A:29:ASP:H | 6 | 0.11 |
| (1,1836) | 1:A:28:VAL:HG22 | 1:A:29:ASP:H | 6 | 0.11 |
| (1,1836) | 1:A:28:VAL:HG23 | 1:A:29:ASP:H | 6 | 0.11 |
| (1,1831) | 1:A:22:ALA:HB1 | 1:A:23:VAL:H | 19 | 0.11 |
| (1,1831) | 1:A:22:ALA:HB2 | 1:A:23:VAL:H | 19 | 0.11 |
| (1,1831) | 1:A:22:ALA:HB3 | 1:A:23:VAL:H | 19 | 0.11 |
| (1,1819) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:11:HIS:HA | 2 | 0.11 |
| (1,1819) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:11:HIS:HA | 2 | 0.11 |
| (1,1819) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:11:HIS:HA | 2 | 0.11 |
| (1,1819) | 1:A:9:THR:HG21 | 1:A:11:HIS:HA | 15 | 0.11 |
| (1,1819) | 1:A:9:THR:HG22 | 1:A:11:HIS:HA | 15 | 0.11 |
| (1,1819) | 1:A:9:THR:HG23 | 1:A:11:HIS:HA | 15 | 0.11 |
| (1,1818) | 1:A:148:ALA:HA | 1:A:180:GLU:HA | 12 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 2 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 2 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 2 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 3 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 4 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 4 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 4 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 9 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 9 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 9 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 10 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 10 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 10 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 11 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 11 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 11 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 13 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 13 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 13 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 16 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 16 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 16 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 17 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 17 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 17 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG21 | 18 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG22 | 18 | 0.11 |
| (1,1810) | 1:A:182:VAL:HA | 1:A:182:VAL:HG23 | 18 | 0.11 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:H | 6 | 0.11 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:H | 6 | 0.11 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:H | 6 | 0.11 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG21 | 1:A:183:ASN:H | 10 | 0.11 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG22 | 1:A:183:ASN:H | 10 | 0.11 |
| (1,1806) | 1:A:182:VAL:HG23 | 1:A:183:ASN:H | 10 | 0.11 |
| (1,1803) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:71:VAL:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,1803) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:71:VAL:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,1803) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:71:VAL:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,1803) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:71:VAL:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,1803) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:71:VAL:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,1803) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:71:VAL:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,1803) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:71:VAL:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,1803) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:71:VAL:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,1803) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:71:VAL:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,1796) | 1:A:25:ALA:HA | 1:A:28:VAL:HB | 20 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE1 | 2 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE2 | 2 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE1 | 2 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE2 | 2 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE1 | 2 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE2 | 2 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE1 | 13 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE2 | 13 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE1 | 13 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE2 | 13 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE1 | 13 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE2 | 13 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE1 | 16 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG21 | 1:A:133:PHE:HE2 | 16 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE1 | 16 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG22 | 1:A:133:PHE:HE2 | 16 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE1 | 16 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:130:THR:HG23 | 1:A:133:PHE:HE2 | 16 | 0.11 |
| (1,1745) | 1:A:23:VAL:HG11 | 1:A:172:GLY:HA2 | 12 | 0.11 |
| (1,1745) | 1:A:23:VAL:HG12 | 1:A:172:GLY:HA2 | 12 | 0.11 |
| (1,1745) | 1:A:23:VAL:HG13 | 1:A:172:GLY:HA2 | 12 | 0.11 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 1 | 0.11 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 1 | 0.11 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 1 | 0.11 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 12 | 0.11 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 12 | 0.11 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 12 | 0.11 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG11 | 1:A:138:PHE:H | 20 | 0.11 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG12 | 1:A:138:PHE:H | 20 | 0.11 |
| (1,1692) | 1:A:101:VAL:HG13 | 1:A:138:PHE:H | 20 | 0.11 |
| (1,1690) | 1:A:144:THR:H | 1:A:181:VAL:HG21 | 14 | 0.11 |
| (1,1690) | 1:A:144:THR:H | 1:A:181:VAL:HG22 | 14 | 0.11 |
| (1,1690) | 1:A:144:THR:H | 1:A:181:VAL:HG23 | 14 | 0.11 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB1 | 20 | 0.11 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:139:ALA:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB1 | 20 | 0.11 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:139:ALA:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB1 | 20 | 0.11 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,1681) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:139:ALA:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD11 | 1:A:138:PHE:H | 6 | 0.11 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD12 | 1:A:138:PHE:H | 6 | 0.11 |
| (1,1669) | 1:A:42:LEU:HD13 | 1:A:138:PHE:H | 6 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG11 | 5 | 0.11 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG12 | 5 | 0.11 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG13 | 5 | 0.11 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG11 | 13 | 0.11 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG12 | 13 | 0.11 |
| (1,1645) | 1:A:100:GLY:HA2 | 1:A:101:VAL:HG13 | 13 | 0.11 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB1 | 1:A:169:THR:HG21 | 5 | 0.11 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB1 | 1:A:169:THR:HG22 | 5 | 0.11 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB1 | 1:A:169:THR:HG23 | 5 | 0.11 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB2 | 1:A:169:THR:HG21 | 5 | 0.11 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB2 | 1:A:169:THR:HG22 | 5 | 0.11 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB2 | 1:A:169:THR:HG23 | 5 | 0.11 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB3 | 1:A:169:THR:HG21 | 5 | 0.11 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB3 | 1:A:169:THR:HG22 | 5 | 0.11 |
| (1,1625) | 1:A:116:ALA:HB3 | 1:A:169:THR:HG23 | 5 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:112:THR:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:112:THR:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,1619) | 1:A:84:ASN:HB2 | 1:A:112:THR:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,1614) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:112:THR:HG21 | 14 | 0.11 |
| (1,1614) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:112:THR:HG22 | 14 | 0.11 |
| (1,1614) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:112:THR:HG23 | 14 | 0.11 |
| (1,1614) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:112:THR:HG21 | 19 | 0.11 |
| (1,1614) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:112:THR:HG22 | 19 | 0.11 |
| (1,1614) | 1:A:84:ASN:HA | 1:A:112:THR:HG23 | 19 | 0.11 |
| (1,1610) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:54:PHE:HA | 6 | 0.11 |
| (1,1610) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:54:PHE:HA | 6 | 0.11 |
| (1,1610) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:54:PHE:HA | 6 | 0.11 |
| (1,1610) | 1:A:32:VAL:HG11 | 1:A:54:PHE:HA | 20 | 0.11 |
| (1,1610) | 1:A:32:VAL:HG12 | 1:A:54:PHE:HA | 20 | 0.11 |
| (1,1610) | 1:A:32:VAL:HG13 | 1:A:54:PHE:HA | 20 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG21 | 2 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG22 | 2 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG23 | 2 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG21 | 2 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG22 | 2 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG23 | 2 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG21 | 2 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG22 | 2 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG23 | 2 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG23 | 3 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG23 | 3 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG23 | 3 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG21 | 12 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG22 | 12 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG23 | 12 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG21 | 12 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG22 | 12 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG23 | 12 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG21 | 12 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG22 | 12 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG23 | 12 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG21 | 13 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG22 | 13 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD21 | 1:A:117:THR:HG23 | 13 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG21 | 13 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG22 | 13 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD22 | 1:A:117:THR:HG23 | 13 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG21 | 13 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG22 | 13 | 0.11 |
| (1,1593) | 1:A:111:LEU:HD23 | 1:A:117:THR:HG23 | 13 | 0.11 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB1 | 2 | 0.11 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:152:ALA:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB1 | 2 | 0.11 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:152:ALA:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB1 | 2 | 0.11 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,1553) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:152:ALA:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,1535) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:137:TYR:HE1 | 7 | 0.11 |
| (1,1535) | 1:A:99:VAL:HG21 | 1:A:137:TYR:HE2 | 7 | 0.11 |
| (1,1535) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:137:TYR:HE1 | 7 | 0.11 |
| (1,1535) | 1:A:99:VAL:HG22 | 1:A:137:TYR:HE2 | 7 | 0.11 |
| (1,1535) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:137:TYR:HE1 | 7 | 0.11 |
| (1,1535) | 1:A:99:VAL:HG23 | 1:A:137:TYR:HE2 | 7 | 0.11 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:75:GLY:H | 10 | 0.11 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:75:GLY:H | 10 | 0.11 |
| (1,1530) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:75:GLY:H | 10 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1529) | 1:A:74:LEU:HD21 | 1:A:115:GLY:H | 18 | 0.11 |
| (1,1529) | 1:A:74:LEU:HD22 | 1:A:115:GLY:H | 18 | 0.11 |
| (1,1529) | 1:A:74:LEU:HD23 | 1:A:115:GLY:H | 18 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:68:LYS:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:68:LYS:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:68:LYS:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:68:LYS:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:68:LYS:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:68:LYS:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:68:LYS:HB3 | 10 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 10 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:68:LYS:HB3 | 10 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:68:LYS:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:68:LYS:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB1 | 1:A:68:LYS:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB2 | 1:A:68:LYS:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,1514) | 1:A:66:ALA:HB3 | 1:A:68:LYS:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:136:ARG:H | 3 | 0.11 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:136:ARG:H | 3 | 0.11 |
| (1,1473) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:136:ARG:H | 3 | 0.11 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:137:TYR:H | 10 | 0.11 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:137:TYR:H | 10 | 0.11 |
| (1,1472) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:137:TYR:H | 10 | 0.11 |
| (1,1469) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:118:PHE:H | 5 | 0.11 |
| (1,1469) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:118:PHE:H | 5 | 0.11 |
| (1,1469) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:118:PHE:H | 5 | 0.11 |
| (1,1469) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:118:PHE:H | 6 | 0.11 |
| (1,1469) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:118:PHE:H | 6 | 0.11 |
| (1,1469) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:118:PHE:H | 6 | 0.11 |
| (1,1452) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:122:THR:H | 18 | 0.11 |
| (1,1452) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:122:THR:H | 18 | 0.11 |
| (1,1452) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:122:THR:H | 18 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:182:VAL:HB | 1 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:182:VAL:HB | 1 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:182:VAL:HB | 1 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:182:VAL:HB | 3 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:182:VAL:HB | 3 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:182:VAL:HB | 3 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:182:VAL:HB | 4 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:182:VAL:HB | 4 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:182:VAL:HB | 4 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:182:VAL:HB | 5 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:182:VAL:HB | 5 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:182:VAL:HB | 5 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:182:VAL:HB | 8 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:182:VAL:HB | 8 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:182:VAL:HB | 8 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:182:VAL:HB | 12 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:182:VAL:HB | 12 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:182:VAL:HB | 12 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:182:VAL:HB | 15 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:182:VAL:HB | 15 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:182:VAL:HB | 15 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:182:VAL:HB | 17 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:182:VAL:HB | 17 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:182:VAL:HB | 17 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:182:VAL:HB | 19 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:182:VAL:HB | 19 | 0.11 |
| (1,1444) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:182:VAL:HB | 19 | 0.11 |
| (1,1438) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:144:THR:HB | 13 | 0.11 |
| (1,1438) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:144:THR:HB | 13 | 0.11 |
| (1,1438) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:144:THR:HB | 13 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:145:PRO:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:145:PRO:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:145:PRO:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:145:PRO:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:145:PRO:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:145:PRO:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:145:PRO:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:145:PRO:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:145:PRO:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:145:PRO:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:145:PRO:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:145:PRO:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:145:PRO:HB2 | 9 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:145:PRO:HB2 | 9 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:145:PRO:HB2 | 9 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:145:PRO:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:145:PRO:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,1434) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:145:PRO:HB2 | 17 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:183:ASN:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:183:ASN:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:183:ASN:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:183:ASN:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:183:ASN:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:183:ASN:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:183:ASN:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:183:ASN:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:183:ASN:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:183:ASN:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:183:ASN:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:183:ASN:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:183:ASN:HB3 | 10 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:183:ASN:HB3 | 10 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:183:ASN:HB3 | 10 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:183:ASN:HB3 | 11 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:183:ASN:HB3 | 11 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:183:ASN:HB3 | 11 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:183:ASN:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:183:ASN:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:183:ASN:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:183:ASN:HB3 | 17 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:183:ASN:HB3 | 17 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:183:ASN:HB3 | 17 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:183:ASN:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:183:ASN:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:183:ASN:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG21 | 1:A:183:ASN:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG22 | 1:A:183:ASN:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,1432) | 1:A:39:THR:HG23 | 1:A:183:ASN:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG21 | 2 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG22 | 2 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG23 | 2 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG21 | 7 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG22 | 7 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG23 | 7 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG21 | 11 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG22 | 11 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG23 | 11 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG21 | 13 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG22 | 13 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG23 | 13 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG21 | 14 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG22 | 14 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG23 | 14 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG21 | 16 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG22 | 16 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG23 | 16 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG21 | 17 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG22 | 17 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG23 | 17 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG21 | 18 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG22 | 18 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:39:THR:HG23 | 18 | 0.11 |
| (1,1411) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HA | 11 | 0.11 |
| (1,1411) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HA | 11 | 0.11 |
| (1,1411) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HA | 11 | 0.11 |
| (1,1411) | 1:A:99:VAL:HG11 | 1:A:137:TYR:HA | 14 | 0.11 |
| (1,1411) | 1:A:99:VAL:HG12 | 1:A:137:TYR:HA | 14 | 0.11 |
| (1,1411) | 1:A:99:VAL:HG13 | 1:A:137:TYR:HA | 14 | 0.11 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD3 | 1 | 0.11 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD3 | 1 | 0.11 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD3 | 1 | 0.11 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD21 | 1:A:136:ARG:HD2 | 1 | 0.11 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD22 | 1:A:136:ARG:HD2 | 1 | 0.11 |
| (1,1385) | 1:A:104:LEU:HD23 | 1:A:136:ARG:HD2 | 1 | 0.11 |
| (1,1360) | 1:A:86:LEU:HD21 | 1:A:87:ALA:H | 12 | 0.11 |
| (1,1360) | 1:A:86:LEU:HD22 | 1:A:87:ALA:H | 12 | 0.11 |
| (1,1360) | 1:A:86:LEU:HD23 | 1:A:87:ALA:H | 12 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HB1 | 6 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HB2 | 6 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD11 | 1:A:135:ALA:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HB1 | 6 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HB2 | 6 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD12 | 1:A:135:ALA:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HB1 | 6 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HB2 | 6 | 0.11 |
| (1,1345) | 1:A:34:LEU:HD13 | 1:A:135:ALA:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD11 | 7 | 0.11 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD12 | 7 | 0.11 |
| (1,1291) | 1:A:41:SER:HA | 1:A:42:LEU:HD13 | 7 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:131:ILE:HG13 | 18 | 0.11 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:131:ILE:HG13 | 18 | 0.11 |
| (1,1262) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:131:ILE:HG13 | 18 | 0.11 |
| (1,1155) | 1:A:67:SER:H | 1:A:123:THR:HG21 | 1 | 0.11 |
| (1,1155) | 1:A:67:SER:H | 1:A:123:THR:HG22 | 1 | 0.11 |
| (1,1155) | 1:A:67:SER:H | 1:A:123:THR:HG23 | 1 | 0.11 |
| (1,1155) | 1:A:67:SER:H | 1:A:123:THR:HG21 | 13 | 0.11 |
| (1,1155) | 1:A:67:SER:H | 1:A:123:THR:HG22 | 13 | 0.11 |
| (1,1155) | 1:A:67:SER:H | 1:A:123:THR:HG23 | 13 | 0.11 |
| (1,1019) | 1:A:100:GLY:H | 1:A:138:PHE:HB2 | 18 | 0.11 |

10 Dihedral-angle violation analysis

No dihedral-angle restraints found