



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 3, 2023 – 08:12 PM EDT

PDB ID : 2KTS
BMRB ID : 16711
Title : NMR structure of the protein NP_415897.1
Authors : Serrano, P.; Jaudzems, K.; Geralt, M.; Horst, R.; Wuthrich, K.; Wilson, I.A.;
Joint Center for Structural Genomics (JCSG)
Deposited on : 2010-02-06

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

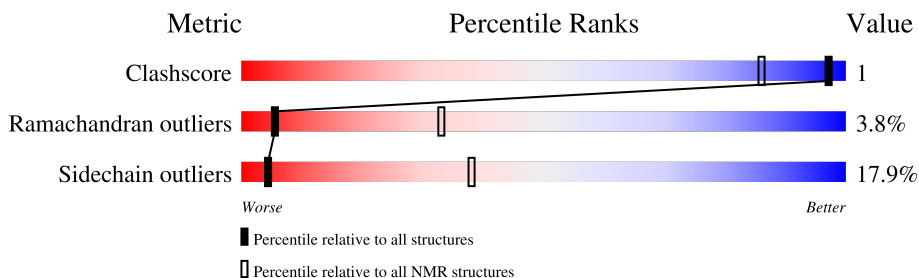
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 87%.

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 | 117 | 82% 15% . |

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 19 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:1-A:114 (114) | 0.80 | 1 |

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

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

The models can be grouped into 2 clusters. No single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1784 atoms, of which 895 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Heat shock protein hslJ.

| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | Trace | |
|-----|-------|----------|-------|-----|-----|-----|-----|-------|---|
| | | | Total | C | H | N | O | | S |
| 1 | A | 117 | 1784 | 548 | 895 | 153 | 177 | 11 | 0 |

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

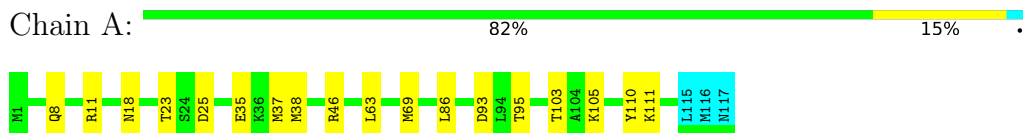
| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment | Reference |
|-------|---------|----------|--------|-----------------------|------------|
| A | 1 | MET | - | initiating methionine | UNP P52644 |

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: Heat shock protein hslJ

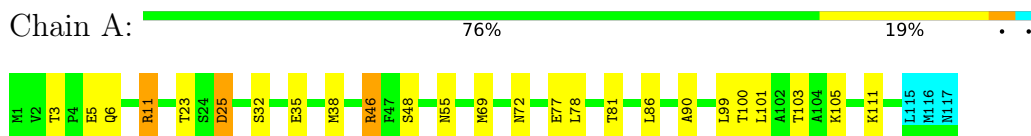


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

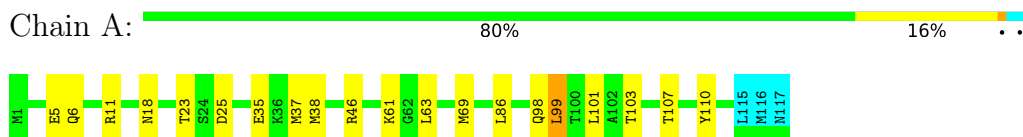
4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

- Molecule 1: Heat shock protein hslJ



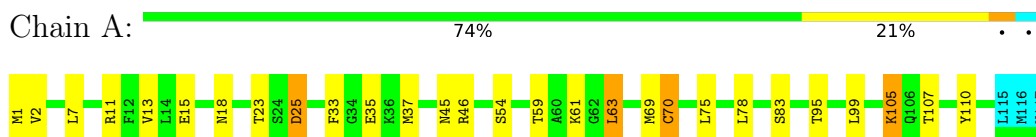
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Heat shock protein hslJ



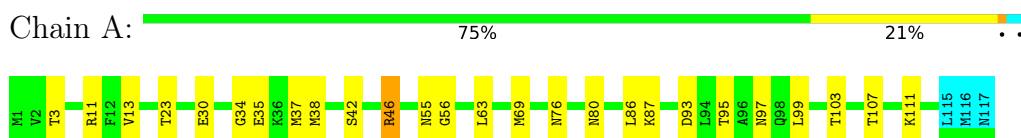
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Heat shock protein hslJ



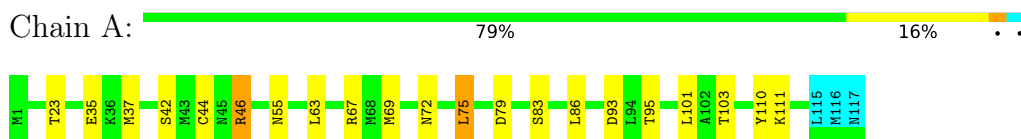
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Heat shock protein hslJ



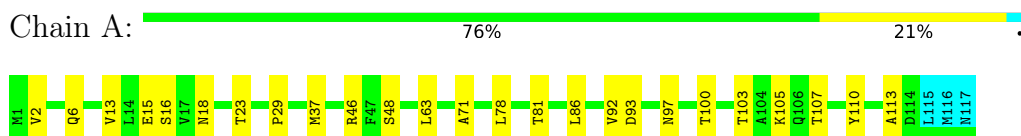
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Heat shock protein hslJ



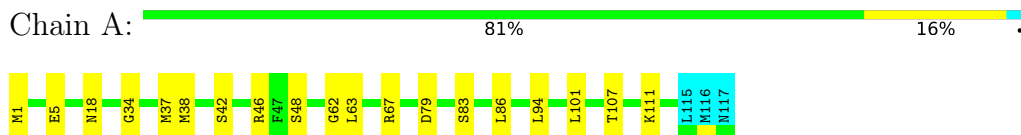
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Heat shock protein hslJ



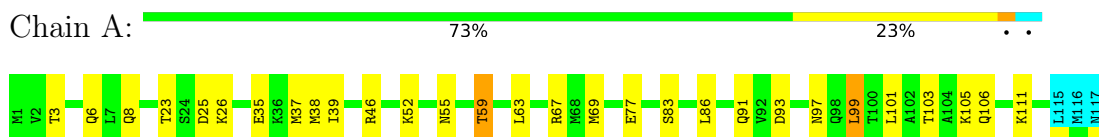
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Heat shock protein hslJ



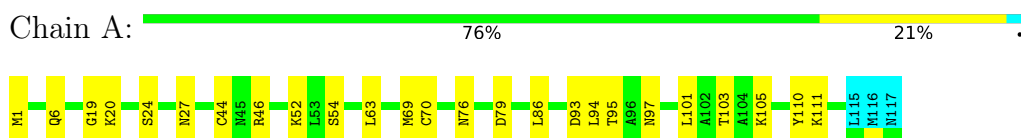
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Heat shock protein hslJ



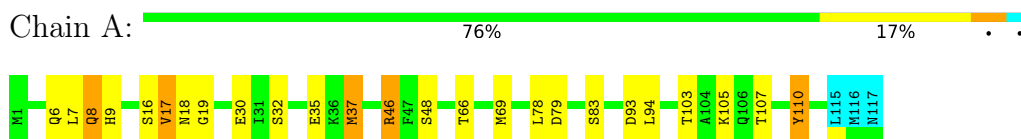
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Heat shock protein hslJ



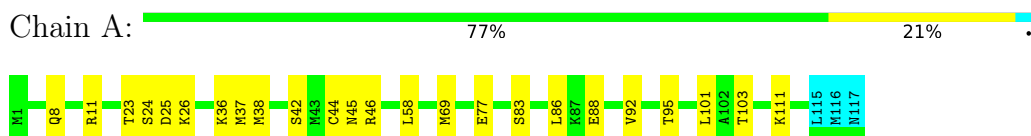
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Heat shock protein hslJ



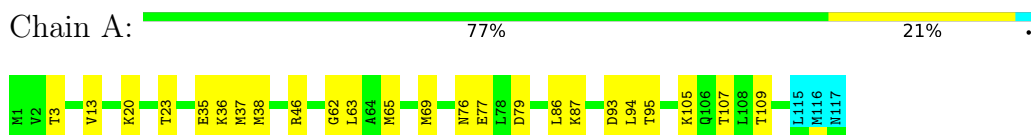
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Heat shock protein hslJ



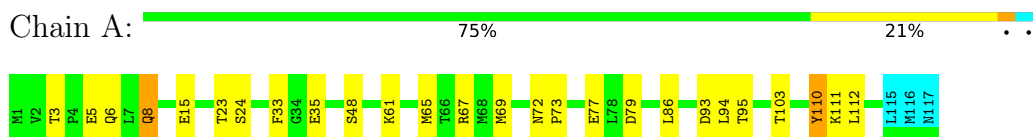
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Heat shock protein hslJ



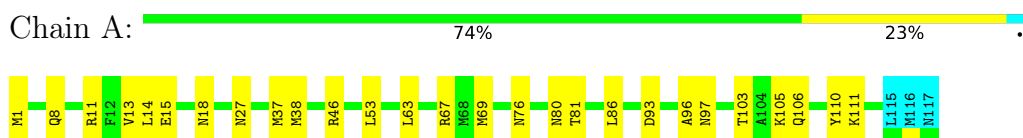
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Heat shock protein hslJ



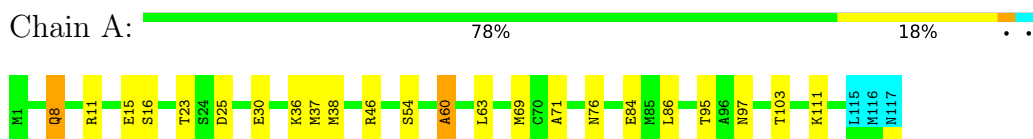
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Heat shock protein hslJ



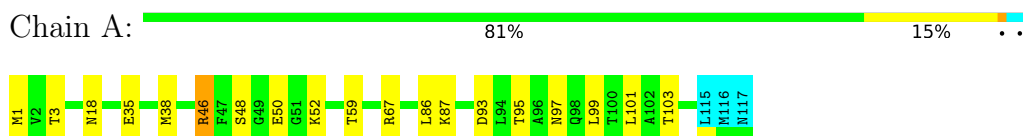
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Heat shock protein hslJ



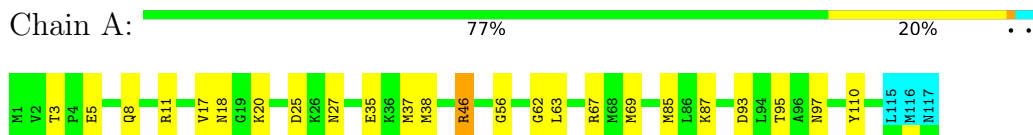
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Heat shock protein hslJ



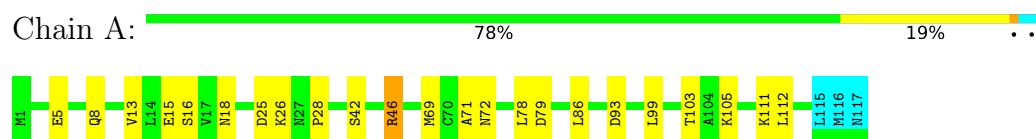
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Heat shock protein hslJ



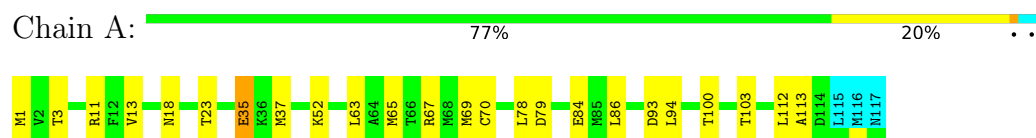
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Heat shock protein hslJ



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Heat shock protein hslJ



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 80 calculated structures, 19 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 | |
| UNIO | structure solution | |

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 | 1340 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1340 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 87% |

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 | 0.52±0.01 | 0±0/876 (0.0± 0.0%) | 1.02±0.03 | 1±1/1180 (0.1± 0.1%) |
| All | All | 0.52 | 0/16644 (0.0%) | 1.02 | 14/22420 (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 | 1.1±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 | 110 | TYR | CB-CG-CD2 | -7.55 | 116.47 | 121.00 | 3 | 3 |
| 1 | A | 110 | TYR | CB-CG-CD1 | -6.45 | 117.13 | 121.00 | 10 | 4 |
| 1 | A | 11 | ARG | NE-CZ-NH2 | -5.81 | 117.40 | 120.30 | 1 | 1 |
| 1 | A | 44 | CYS | CA-CB-SG | 5.62 | 124.13 | 114.00 | 5 | 1 |
| 1 | A | 85 | MET | CA-CB-CG | 5.59 | 122.80 | 113.30 | 17 | 1 |
| 1 | A | 46 | ARG | NE-CZ-NH2 | -5.41 | 117.59 | 120.30 | 5 | 2 |
| 1 | A | 34 | GLY | C-N-CA | 5.22 | 134.76 | 121.70 | 4 | 2 |

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 | 11 | ARG | Sidechain | 6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Group | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|-------------------|----------------|
| 1 | A | 110 | TYR | Sidechain | 4 |
| 1 | A | 59 | THR | Peptide | 2 |
| 1 | A | 46 | ARG | Sidechain,Peptide | 2 |
| 1 | A | 1 | MET | Peptide | 1 |
| 1 | A | 54 | SER | Peptide | 1 |
| 1 | A | 33 | PHE | Sidechain | 1 |
| 1 | A | 60 | ALA | Peptide | 1 |
| 1 | A | 28 | PRO | Peptide | 1 |
| 1 | A | 100 | THR | Peptide | 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 | 865 | 869 | 871 | 1±1 |
| All | All | 16435 | 16511 | 16549 | 20 |

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 1.

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

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|------------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:106:GLN:HE21 | 0.60 | 1.56 | 14 | 1 |
| 1:A:99:LEU:HD22 | 1:A:101:LEU:CD2 | 0.59 | 2.27 | 2 | 2 |
| 1:A:6:GLN:HE21 | 1:A:94:LEU:HD23 | 0.57 | 1.60 | 10 | 1 |
| 1:A:13:VAL:CG1 | 1:A:113:ALA:HB3 | 0.57 | 2.30 | 6 | 1 |
| 1:A:72:ASN:HB3 | 1:A:75:LEU:HD22 | 0.54 | 1.79 | 5 | 1 |
| 1:A:90:ALA:HB1 | 1:A:101:LEU:HD12 | 0.52 | 1.81 | 1 | 1 |
| 1:A:7:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD22 | 0.50 | 1.84 | 10 | 1 |
| 1:A:72:ASN:CB | 1:A:75:LEU:HD22 | 0.49 | 2.38 | 5 | 1 |
| 1:A:44:CYS:CB | 1:A:70:CYS:SG | 0.48 | 3.01 | 9 | 1 |
| 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:92:VAL:HG21 | 0.45 | 1.88 | 11 | 1 |
| 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:92:VAL:O | 0.44 | 2.13 | 6 | 1 |
| 1:A:42:SER:HA | 1:A:46:ARG:HA | 0.43 | 1.90 | 18 | 1 |
| 1:A:70:CYS:SG | 1:A:75:LEU:HB2 | 0.42 | 2.55 | 3 | 1 |
| 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:18:ASN:H | 0.42 | 1.75 | 10 | 2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:60:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HB3 | 0.41 | 1.92 | 15 | 1 |
| 1:A:8:GLN:HG2 | 1:A:9:HIS:CD2 | 0.41 | 2.50 | 10 | 1 |
| 1:A:90:ALA:HB1 | 1:A:101:LEU:CD1 | 0.40 | 2.46 | 1 | 1 |
| 1:A:7:LEU:HD22 | 1:A:33:PHE:CE2 | 0.40 | 2.51 | 3 | 1 |

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

| Mol | Chain | Analysed | Favoured | Allowed | Outliers | Percentiles | |
|-----|-------|-----------------|--------------|--------------|------------|-------------|----|
| 1 | A | 113/117 (97%) | 87±4 (77±3%) | 22±4 (19±3%) | 4±2 (4±1%) | 5 | 33 |
| All | All | 2147/2223 (97%) | 1651 (77%) | 414 (19%) | 82 (4%) | 5 | 33 |

All 29 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 | 46 | ARG | 13 |
| 1 | A | 35 | GLU | 9 |
| 1 | A | 6 | GLN | 6 |
| 1 | A | 25 | ASP | 5 |
| 1 | A | 63 | LEU | 5 |
| 1 | A | 105 | LYS | 5 |
| 1 | A | 8 | GLN | 5 |
| 1 | A | 71 | ALA | 3 |
| 1 | A | 62 | GLY | 3 |
| 1 | A | 112 | LEU | 3 |
| 1 | A | 55 | ASN | 2 |
| 1 | A | 56 | GLY | 2 |
| 1 | A | 97 | ASN | 2 |
| 1 | A | 37 | MET | 2 |
| 1 | A | 19 | GLY | 2 |
| 1 | A | 52 | LYS | 2 |
| 1 | A | 2 | VAL | 1 |
| 1 | A | 29 | PRO | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 81 | THR | 1 |
| 1 | A | 39 | ILE | 1 |
| 1 | A | 17 | VAL | 1 |
| 1 | A | 36 | LYS | 1 |
| 1 | A | 44 | CYS | 1 |
| 1 | A | 73 | PRO | 1 |
| 1 | A | 95 | THR | 1 |
| 1 | A | 96 | ALA | 1 |
| 1 | A | 54 | SER | 1 |
| 1 | A | 50 | GLU | 1 |
| 1 | A | 113 | ALA | 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 | 98/101 (97%) | 80±3 (82±3%) | 18±3 (18±3%) | 4 | 38 |
| All | All | 1862/1919 (97%) | 1529 (82%) | 333 (18%) | 4 | 38 |

All 67 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 | 69 | MET | 16 |
| 1 | A | 86 | LEU | 15 |
| 1 | A | 103 | THR | 15 |
| 1 | A | 37 | MET | 13 |
| 1 | A | 93 | ASP | 13 |
| 1 | A | 23 | THR | 12 |
| 1 | A | 38 | MET | 11 |
| 1 | A | 111 | LYS | 11 |
| 1 | A | 63 | LEU | 9 |
| 1 | A | 95 | THR | 9 |
| 1 | A | 3 | THR | 8 |
| 1 | A | 18 | ASN | 8 |
| 1 | A | 67 | ARG | 8 |
| 1 | A | 79 | ASP | 8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 99 | LEU | 7 |
| 1 | A | 107 | THR | 7 |
| 1 | A | 5 | GLU | 6 |
| 1 | A | 46 | ARG | 6 |
| 1 | A | 48 | SER | 6 |
| 1 | A | 78 | LEU | 6 |
| 1 | A | 13 | VAL | 6 |
| 1 | A | 15 | GLU | 6 |
| 1 | A | 83 | SER | 6 |
| 1 | A | 97 | ASN | 6 |
| 1 | A | 25 | ASP | 5 |
| 1 | A | 77 | GLU | 5 |
| 1 | A | 105 | LYS | 5 |
| 1 | A | 1 | MET | 5 |
| 1 | A | 76 | ASN | 5 |
| 1 | A | 101 | LEU | 5 |
| 1 | A | 94 | LEU | 5 |
| 1 | A | 8 | GLN | 5 |
| 1 | A | 35 | GLU | 4 |
| 1 | A | 42 | SER | 4 |
| 1 | A | 87 | LYS | 4 |
| 1 | A | 16 | SER | 4 |
| 1 | A | 72 | ASN | 3 |
| 1 | A | 61 | LYS | 3 |
| 1 | A | 11 | ARG | 3 |
| 1 | A | 30 | GLU | 3 |
| 1 | A | 26 | LYS | 3 |
| 1 | A | 20 | LYS | 3 |
| 1 | A | 24 | SER | 3 |
| 1 | A | 27 | ASN | 3 |
| 1 | A | 65 | MET | 3 |
| 1 | A | 32 | SER | 2 |
| 1 | A | 55 | ASN | 2 |
| 1 | A | 100 | THR | 2 |
| 1 | A | 45 | ASN | 2 |
| 1 | A | 59 | THR | 2 |
| 1 | A | 70 | CYS | 2 |
| 1 | A | 80 | ASN | 2 |
| 1 | A | 52 | LYS | 2 |
| 1 | A | 36 | LYS | 2 |
| 1 | A | 84 | GLU | 2 |
| 1 | A | 81 | THR | 1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 98 | GLN | 1 |
| 1 | A | 54 | SER | 1 |
| 1 | A | 75 | LEU | 1 |
| 1 | A | 110 | TYR | 1 |
| 1 | A | 91 | GLN | 1 |
| 1 | A | 106 | GLN | 1 |
| 1 | A | 66 | THR | 1 |
| 1 | A | 88 | GLU | 1 |
| 1 | A | 109 | THR | 1 |
| 1 | A | 14 | LEU | 1 |
| 1 | A | 53 | LEU | 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 87% for the well-defined parts and 87% 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 | 1340 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1340 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Number of shift outliers (ShiftChecker) | 0 |

7.1.2 Chemical shift referencing [i](#)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

| Nucleus | # values | Correction \pm precision, ppm | Suggested action |
|------------------------|----------|---------------------------------|--------------------------|
| $^{13}\text{C}_\alpha$ | 117 | -0.50 ± 0.15 | Should be applied |
| $^{13}\text{C}_\beta$ | 109 | -0.49 ± 0.06 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}\text{C}'$ | 0 | — | None (insufficient data) |
| ^{15}N | 111 | 0.04 ± 0.38 | 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 87%, i.e. 1299 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1497. 0 out of 18 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ^1H | ^{13}C | ^{15}N |
|-----------|---------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone | 452/568 (80%) | 230/231 (100%) | 114/228 (50%) | 108/109 (99%) |
| Sidechain | 805/876 (92%) | 543/570 (95%) | 243/275 (88%) | 19/31 (61%) |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| | Total | ¹ H | ¹³ C | ¹⁵ N |
|----------|-----------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Aromatic | 42/53 (79%) | 23/27 (85%) | 19/24 (79%) | 0/2 (0%) |
| Overall | 1299/1497 (87%) | 796/828 (96%) | 376/527 (71%) | 127/142 (89%) |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 87%, i.e. 1340 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1542. 0 out of 19 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ¹ H | ¹³ C | ¹⁵ N |
|-----------|-----------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone | 464/583 (80%) | 236/237 (100%) | 117/234 (50%) | 111/112 (99%) |
| Sidechain | 834/906 (92%) | 563/590 (95%) | 251/284 (88%) | 20/32 (62%) |
| Aromatic | 42/53 (79%) | 23/27 (85%) | 19/24 (79%) | 0/2 (0%) |
| Overall | 1340/1542 (87%) | 822/854 (96%) | 387/542 (71%) | 131/146 (90%) |

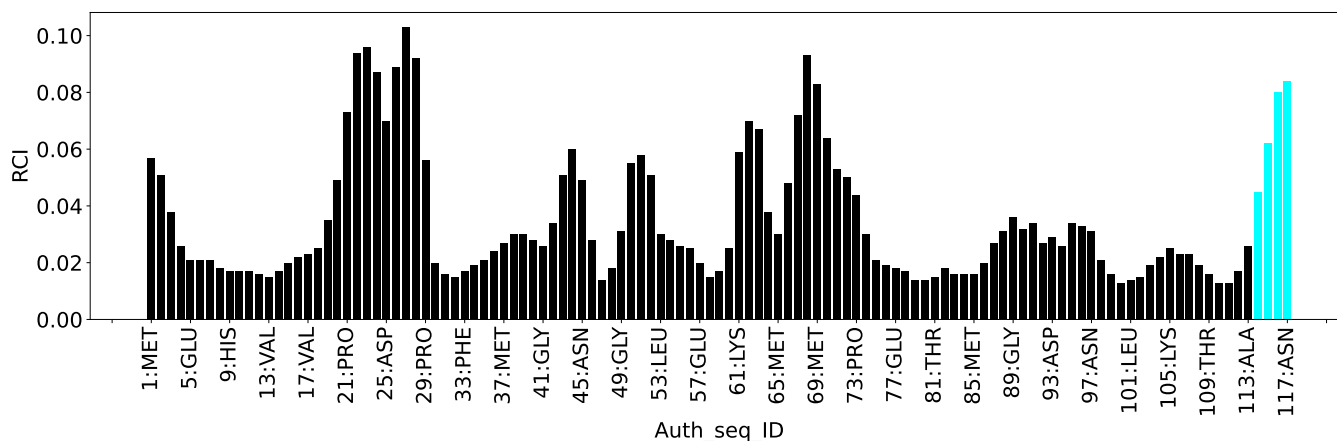
7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

There are no statistically unusual chemical shifts.

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis

8.1 Conformationally restricting restraints

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

| Description | Value |
|--|-------|
| Total distance restraints | 2204 |
| Intra-residue ($ i-j =0$) | 484 |
| Sequential ($ i-j =1$) | 631 |
| Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$) | 308 |
| Long range ($ i-j \geq 5$) | 778 |
| Inter-chain | 0 |
| Hydrogen bond restraints | 0 |
| Disulfide bond restraints | 3 |
| Total dihedral-angle restraints | 0 |
| Number of unmapped restraints | 0 |
| Number of restraints per residue | 18.8 |
| Number of long range restraints per residue ¹ | 6.7 |

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) | 26.4 | 0.2 |
| 0.2-0.5 (Medium) | 45.1 | 0.5 |
| >0.5 (Large) | 101.0 | 3.06 |

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

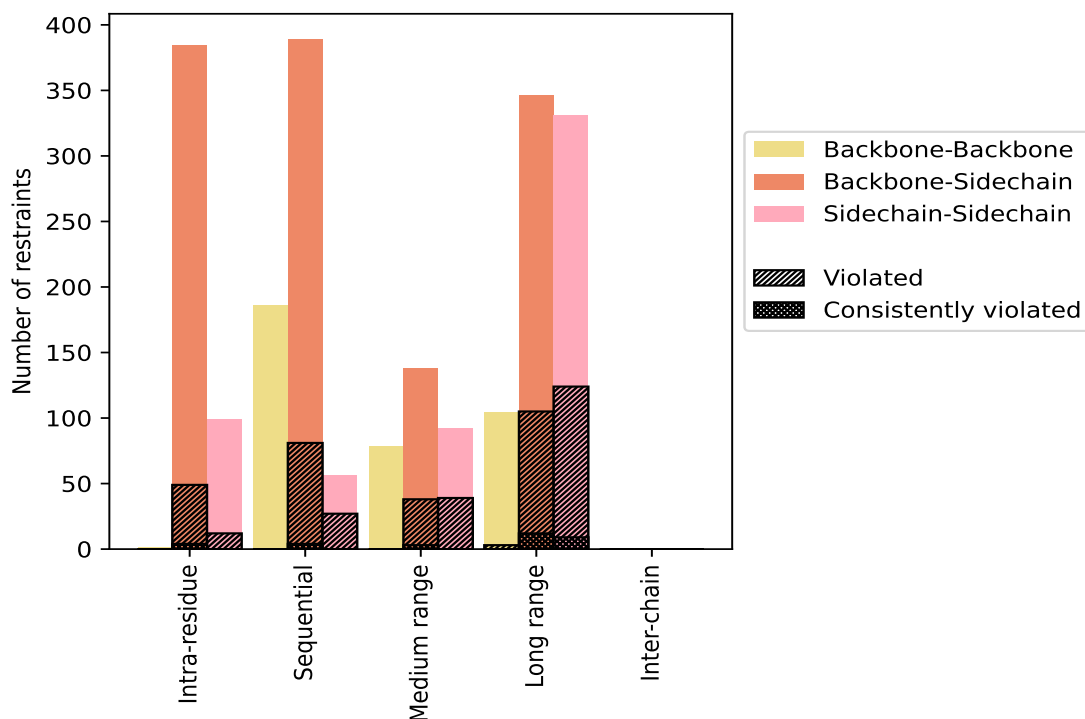
9.1 Summary of distance violations

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

| Restrains type | Count | % ¹ | Violated ³ | | | Consistently Violated ⁴ | | |
|---|-------------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
| | | | Count | % ² | % ¹ | Count | % ² | % ¹ |
| Intra-residue ($i-j =0$) | 484 | 22.0 | 61 | 12.6 | 2.8 | 4 | 0.8 | 0.2 |
| Backbone-Backbone | 1 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 384 | 17.4 | 49 | 12.8 | 2.2 | 4 | 1.0 | 0.2 |
| Sidechain-Sidechain | 99 | 4.5 | 12 | 12.1 | 0.5 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sequential ($i-j =1$) | 631 | 28.6 | 108 | 17.1 | 4.9 | 4 | 0.6 | 0.2 |
| Backbone-Backbone | 186 | 8.4 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 389 | 17.6 | 81 | 20.8 | 3.7 | 4 | 1.0 | 0.2 |
| Sidechain-Sidechain | 56 | 2.5 | 27 | 48.2 | 1.2 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$) | 308 | 14.0 | 77 | 25.0 | 3.5 | 3 | 1.0 | 0.1 |
| Backbone-Backbone | 78 | 3.5 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 138 | 6.3 | 38 | 27.5 | 1.7 | 3 | 2.2 | 0.1 |
| Sidechain-Sidechain | 92 | 4.2 | 39 | 42.4 | 1.8 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Long range ($i-j \geq 5$) | 778 | 35.3 | 231 | 29.7 | 10.5 | 20 | 2.6 | 0.9 |
| Backbone-Backbone | 104 | 4.7 | 3 | 2.9 | 0.1 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 346 | 15.7 | 105 | 30.3 | 4.8 | 12 | 3.5 | 0.5 |
| Sidechain-Sidechain | 328 | 14.9 | 123 | 37.5 | 5.6 | 8 | 2.4 | 0.4 |
| 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 | 3 | 0.1 | 1 | 33.3 | 0.0 | 1 | 33.3 | 0.0 |
| Total | 2204 | 100.0 | 478 | 21.7 | 21.7 | 32 | 1.5 | 1.5 |
| Backbone-Backbone | 369 | 16.7 | 3 | 0.8 | 0.1 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 1257 | 57.0 | 273 | 21.7 | 12.4 | 23 | 1.8 | 1.0 |
| Sidechain-Sidechain | 578 | 26.2 | 202 | 34.9 | 9.2 | 9 | 1.6 | 0.4 |

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 | 37 | 15 | 84 | 0 | 153 | 0.74 | 3.02 | 0.57 | 0.64 |
| 2 | 23 | 37 | 13 | 90 | 0 | 163 | 0.73 | 2.9 | 0.55 | 0.58 |
| 3 | 21 | 32 | 20 | 80 | 0 | 153 | 0.68 | 2.88 | 0.53 | 0.5 |
| 4 | 22 | 38 | 18 | 92 | 0 | 170 | 0.7 | 2.47 | 0.48 | 0.6 |
| 5 | 21 | 38 | 13 | 98 | 0 | 170 | 0.72 | 2.99 | 0.56 | 0.58 |
| 6 | 23 | 39 | 20 | 108 | 0 | 190 | 0.74 | 3.06 | 0.52 | 0.64 |
| 7 | 26 | 40 | 27 | 106 | 0 | 199 | 0.77 | 2.5 | 0.54 | 0.63 |
| 8 | 18 | 35 | 25 | 78 | 0 | 156 | 0.75 | 2.14 | 0.48 | 0.7 |
| 9 | 22 | 39 | 32 | 111 | 0 | 204 | 0.76 | 2.55 | 0.56 | 0.59 |
| 10 | 20 | 35 | 14 | 93 | 0 | 162 | 0.78 | 2.7 | 0.54 | 0.64 |
| 11 | 23 | 37 | 28 | 100 | 0 | 188 | 0.79 | 2.88 | 0.57 | 0.74 |

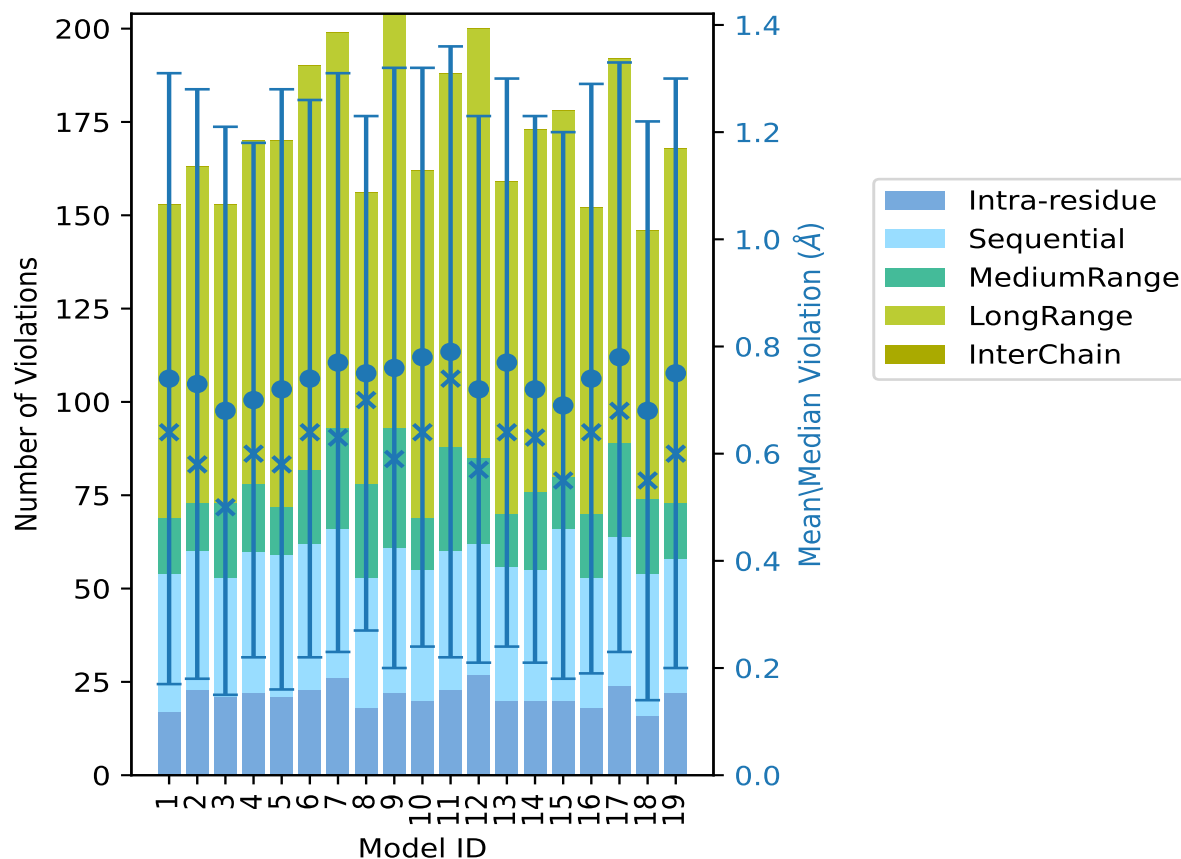
Continued on next page...

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 | 27 | 35 | 23 | 115 | 0 | 200 | 0.72 | 2.5 | 0.51 | 0.57 |
| 13 | 20 | 36 | 14 | 89 | 0 | 159 | 0.77 | 2.43 | 0.53 | 0.64 |
| 14 | 20 | 35 | 21 | 97 | 0 | 173 | 0.72 | 2.68 | 0.51 | 0.63 |
| 15 | 20 | 46 | 14 | 98 | 0 | 178 | 0.69 | 2.42 | 0.51 | 0.55 |
| 16 | 18 | 35 | 17 | 82 | 0 | 152 | 0.74 | 2.69 | 0.55 | 0.64 |
| 17 | 24 | 40 | 25 | 103 | 0 | 192 | 0.78 | 2.86 | 0.55 | 0.68 |
| 18 | 16 | 38 | 20 | 72 | 0 | 146 | 0.68 | 2.69 | 0.54 | 0.55 |
| 19 | 22 | 36 | 15 | 95 | 0 | 168 | 0.75 | 2.5 | 0.55 | 0.6 |

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

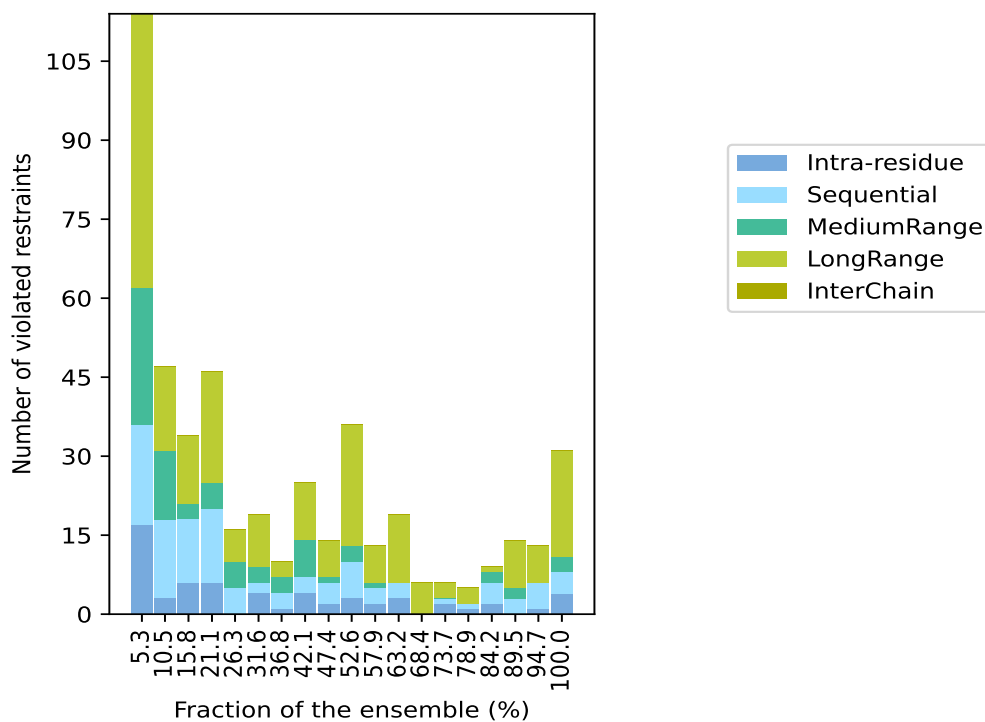
9.3 Distance violation statistics for the ensemble

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, 1724(IR:423, SQ:523, MR:231, LR:547, 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 | % |
| 17 | 19 | 26 | 52 | 0 | 114 | 1 | 5.3 |
| 3 | 15 | 13 | 16 | 0 | 47 | 2 | 10.5 |
| 6 | 12 | 3 | 13 | 0 | 34 | 3 | 15.8 |
| 6 | 14 | 5 | 21 | 0 | 46 | 4 | 21.1 |
| 0 | 5 | 5 | 6 | 0 | 16 | 5 | 26.3 |
| 4 | 2 | 3 | 10 | 0 | 19 | 6 | 31.6 |
| 1 | 3 | 3 | 3 | 0 | 10 | 7 | 36.8 |
| 4 | 3 | 7 | 11 | 0 | 25 | 8 | 42.1 |
| 2 | 4 | 1 | 7 | 0 | 14 | 9 | 47.4 |
| 3 | 7 | 3 | 23 | 0 | 36 | 10 | 52.6 |
| 2 | 3 | 1 | 7 | 0 | 13 | 11 | 57.9 |
| 3 | 3 | 0 | 13 | 0 | 19 | 12 | 63.2 |
| 0 | 0 | 0 | 6 | 0 | 6 | 13 | 68.4 |
| 2 | 1 | 0 | 3 | 0 | 6 | 14 | 73.7 |
| 1 | 1 | 0 | 3 | 0 | 5 | 15 | 78.9 |
| 2 | 4 | 2 | 1 | 0 | 9 | 16 | 84.2 |
| 0 | 3 | 2 | 9 | 0 | 14 | 17 | 89.5 |
| 1 | 5 | 0 | 7 | 0 | 13 | 18 | 94.7 |
| 4 | 4 | 3 | 20 | 0 | 31 | 19 | 100.0 |

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

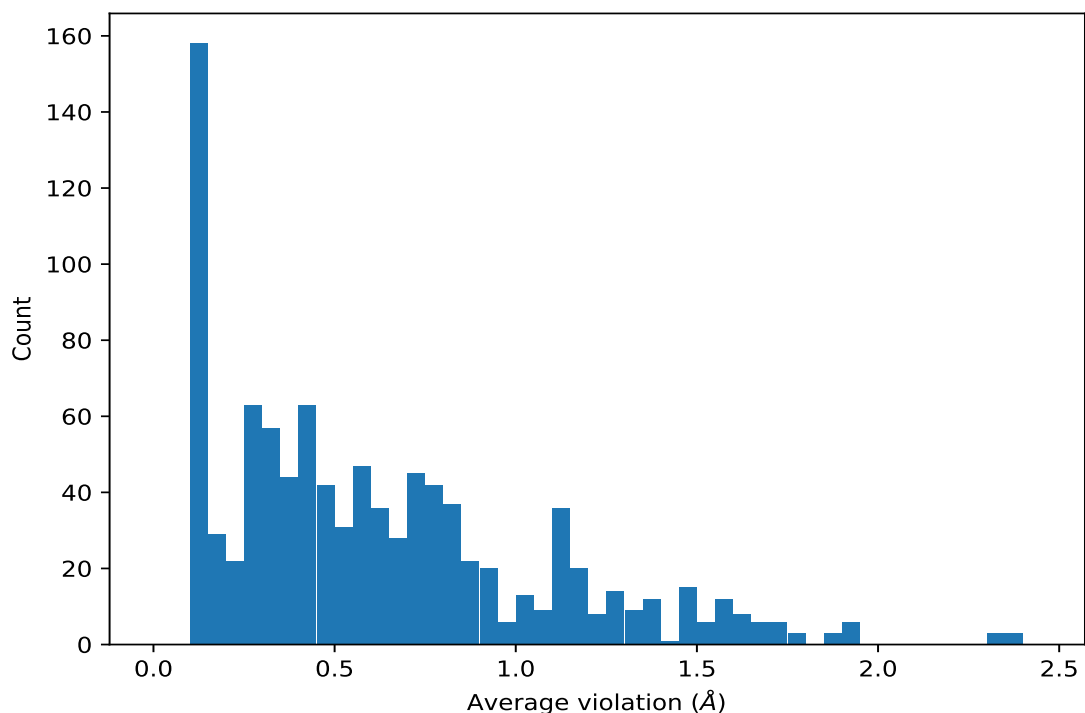
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 19 | 2.39 | 0.22 | 2.43 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 19 | 2.39 | 0.22 | 2.43 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 19 | 2.39 | 0.22 | 2.43 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 19 | 2.31 | 0.35 | 2.38 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 19 | 2.31 | 0.35 | 2.38 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 19 | 2.31 | 0.35 | 2.38 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 19 | 1.92 | 0.24 | 1.98 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 19 | 1.92 | 0.24 | 1.98 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 19 | 1.92 | 0.24 | 1.98 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 19 | 1.87 | 0.99 | 2.39 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 19 | 1.87 | 0.99 | 2.39 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 19 | 1.87 | 0.99 | 2.39 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 19 | 1.75 | 0.4 | 1.88 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 19 | 1.75 | 0.4 | 1.88 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 19 | 1.75 | 0.4 | 1.88 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 19 | 1.73 | 0.19 | 1.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 19 | 1.73 | 0.19 | 1.64 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 19 | 1.73 | 0.19 | 1.64 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 19 | 1.73 | 0.25 | 1.79 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 19 | 1.73 | 0.25 | 1.79 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 19 | 1.73 | 0.25 | 1.79 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 19 | 1.67 | 0.22 | 1.68 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 19 | 1.67 | 0.22 | 1.68 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 19 | 1.67 | 0.22 | 1.68 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 19 | 1.61 | 0.44 | 1.42 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 19 | 1.61 | 0.44 | 1.42 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 19 | 1.61 | 0.44 | 1.42 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 19 | 1.37 | 0.24 | 1.36 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 19 | 1.23 | 0.18 | 1.25 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 19 | 1.19 | 0.18 | 1.22 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 19 | 1.19 | 0.18 | 1.22 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 19 | 1.19 | 0.18 | 1.22 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 19 | 1.18 | 0.24 | 1.2 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 1.09 | 0.29 | 1.11 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 1.09 | 0.29 | 1.11 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 1.09 | 0.29 | 1.11 |
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 19 | 0.99 | 0.24 | 1.04 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 19 | 0.89 | 0.36 | 0.85 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 19 | 0.89 | 0.36 | 0.85 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 19 | 0.89 | 0.36 | 0.85 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 19 | 0.83 | 0.1 | 0.81 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 19 | 0.83 | 0.1 | 0.81 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 19 | 0.83 | 0.1 | 0.81 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 19 | 0.81 | 0.31 | 0.79 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 19 | 0.81 | 0.31 | 0.79 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 19 | 0.81 | 0.31 | 0.79 |
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 19 | 0.79 | 0.17 | 0.8 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 19 | 0.77 | 0.28 | 0.76 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 19 | 0.74 | 0.15 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 19 | 0.74 | 0.15 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 19 | 0.74 | 0.15 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 19 | 0.74 | 0.15 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 19 | 0.74 | 0.15 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 19 | 0.74 | 0.15 | 0.75 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 19 | 0.71 | 0.05 | 0.71 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 19 | 0.71 | 0.05 | 0.71 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 19 | 0.71 | 0.05 | 0.71 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 0.7 | 0.03 | 0.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 0.7 | 0.03 | 0.7 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 0.7 | 0.03 | 0.7 |
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 19 | 0.63 | 0.19 | 0.63 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 19 | 0.61 | 0.1 | 0.61 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 19 | 0.6 | 0.14 | 0.64 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 19 | 0.6 | 0.16 | 0.6 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 19 | 0.57 | 0.19 | 0.58 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 19 | 0.56 | 0.31 | 0.4 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 19 | 0.52 | 0.11 | 0.5 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 19 | 0.3 | 0.11 | 0.31 |
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 19 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| (1,448) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 18 | 1.64 | 0.32 | 1.57 |
| (1,117) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 18 | 1.08 | 0.25 | 1.08 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE22 | 18 | 0.78 | 0.13 | 0.86 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE22 | 18 | 0.78 | 0.13 | 0.86 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE22 | 18 | 0.78 | 0.13 | 0.86 |
| (1,1918) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HB3 | 18 | 0.75 | 0.03 | 0.76 |
| (1,2016) | 1:A:106:GLN:HE22 | 1:A:107:THR:H | 18 | 0.74 | 0.37 | 0.69 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 18 | 0.72 | 0.34 | 0.72 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 18 | 0.72 | 0.34 | 0.72 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 18 | 0.72 | 0.34 | 0.72 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 18 | 0.72 | 0.43 | 0.5 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD12 | 18 | 0.72 | 0.43 | 0.5 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD13 | 18 | 0.72 | 0.43 | 0.5 |
| (1,561) | 1:A:45:ASN:HA | 1:A:46:ARG:HB3 | 18 | 0.72 | 0.18 | 0.77 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 18 | 0.61 | 0.19 | 0.59 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD22 | 18 | 0.61 | 0.19 | 0.59 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD23 | 18 | 0.61 | 0.19 | 0.59 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 18 | 0.61 | 0.19 | 0.59 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 18 | 0.61 | 0.19 | 0.59 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 18 | 0.61 | 0.19 | 0.59 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HB3 | 18 | 0.58 | 0.26 | 0.6 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HB3 | 18 | 0.58 | 0.26 | 0.6 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HB3 | 18 | 0.58 | 0.26 | 0.6 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HB3 | 18 | 0.58 | 0.26 | 0.6 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HB3 | 18 | 0.58 | 0.26 | 0.6 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HB3 | 18 | 0.58 | 0.26 | 0.6 |
| (1,537) | 1:A:65:MET:HG3 | 1:A:66:THR:H | 18 | 0.56 | 0.16 | 0.6 |
| (1,1691) | 1:A:98:GLN:HB2 | 1:A:99:LEU:H | 18 | 0.29 | 0.07 | 0.29 |
| (1,240) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HB2 | 18 | 0.28 | 0.08 | 0.32 |
| (1,1937) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:H | 17 | 1.4 | 0.21 | 1.37 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 1.35 | 0.74 | 1.06 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 1.35 | 0.74 | 1.06 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 1.35 | 0.74 | 1.06 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG21 | 17 | 1.25 | 0.05 | 1.22 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG22 | 17 | 1.25 | 0.05 | 1.22 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG23 | 17 | 1.25 | 0.05 | 1.22 |
| (1,1277) | 1:A:13:VAL:HA | 1:A:110:TYR:HB2 | 17 | 1.18 | 0.24 | 1.17 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:110:TYR:HB2 | 17 | 1.15 | 0.54 | 1.26 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:110:TYR:HB2 | 17 | 1.15 | 0.54 | 1.26 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:110:TYR:HB2 | 17 | 1.15 | 0.54 | 1.26 |
| (1,1843) | 1:A:23:THR:H | 1:A:74:GLN:HE21 | 17 | 0.96 | 0.45 | 0.99 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE1 | 1:A:83:SER:HB3 | 17 | 0.9 | 0.31 | 0.86 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE2 | 1:A:83:SER:HB3 | 17 | 0.9 | 0.31 | 0.86 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE3 | 1:A:83:SER:HB3 | 17 | 0.9 | 0.31 | 0.86 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.77 | 0.24 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.77 | 0.24 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.77 | 0.24 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.77 | 0.24 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.77 | 0.24 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.77 | 0.24 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.77 | 0.24 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.77 | 0.24 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.77 | 0.24 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.77 | 0.24 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.77 | 0.24 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.77 | 0.24 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.77 | 0.24 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.77 | 0.24 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.77 | 0.24 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.77 | 0.24 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.77 | 0.24 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.77 | 0.24 | 0.72 |
| (1,1869) | 1:A:84:GLU:H | 1:A:85:MET:HG2 | 17 | 0.58 | 0.15 | 0.63 |
| (1,1255) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HB3 | 17 | 0.56 | 0.14 | 0.63 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:51:GLY:HA2 | 17 | 0.51 | 0.19 | 0.55 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:51:GLY:HA2 | 17 | 0.51 | 0.19 | 0.55 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:51:GLY:HA2 | 17 | 0.51 | 0.19 | 0.55 |
| (1,273) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HB2 | 17 | 0.42 | 0.09 | 0.47 |
| (1,158) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:46:ARG:H | 17 | 0.37 | 0.09 | 0.39 |
| (1,514) | 1:A:20:LYS:HA | 1:A:21:PRO:HB2 | 17 | 0.3 | 0.04 | 0.3 |
| (1,2148) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 16 | 1.27 | 0.04 | 1.28 |
| (1,1405) | 1:A:8:GLN:HA | 1:A:8:GLN:HE22 | 16 | 0.96 | 0.09 | 0.94 |
| (1,1259) | 1:A:39:ILE:HA | 1:A:40:SER:HB3 | 16 | 0.7 | 0.08 | 0.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD11 | 1:A:116:MET:H | 16 | 0.64 | 0.1 | 0.64 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD12 | 1:A:116:MET:H | 16 | 0.64 | 0.1 | 0.64 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD13 | 1:A:116:MET:H | 16 | 0.64 | 0.1 | 0.64 |
| (1,605) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:8:GLN:HE22 | 16 | 0.55 | 0.23 | 0.46 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HB3 | 16 | 0.48 | 0.18 | 0.42 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HB3 | 16 | 0.48 | 0.18 | 0.42 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HB3 | 16 | 0.48 | 0.18 | 0.42 |
| (1,1254) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HG2 | 16 | 0.4 | 0.19 | 0.41 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD11 | 16 | 0.32 | 0.12 | 0.34 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD12 | 16 | 0.32 | 0.12 | 0.34 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD13 | 16 | 0.32 | 0.12 | 0.34 |
| (1,380) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:52:LYS:HB2 | 16 | 0.3 | 0.13 | 0.3 |
| (1,1560) | 1:A:69:MET:HA | 1:A:70:CYS:HB3 | 15 | 0.76 | 0.15 | 0.78 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:51:GLY:HA2 | 15 | 0.47 | 0.17 | 0.53 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 15 | 0.47 | 0.17 | 0.53 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 15 | 0.47 | 0.17 | 0.53 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD11 | 15 | 0.47 | 0.26 | 0.42 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD12 | 15 | 0.47 | 0.26 | 0.42 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD13 | 15 | 0.47 | 0.26 | 0.42 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD11 | 15 | 0.47 | 0.26 | 0.42 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD12 | 15 | 0.47 | 0.26 | 0.42 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD13 | 15 | 0.47 | 0.26 | 0.42 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB1 | 1:A:86:LEU:HB2 | 15 | 0.46 | 0.21 | 0.4 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HB2 | 15 | 0.46 | 0.21 | 0.4 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB3 | 1:A:86:LEU:HB2 | 15 | 0.46 | 0.21 | 0.4 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG21 | 15 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG22 | 15 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG23 | 15 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1659) | 1:A:20:LYS:HB2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 14 | 1.41 | 0.36 | 1.51 |
| (1,248) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:H | 14 | 0.92 | 0.2 | 0.92 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE1 | 14 | 0.65 | 0.33 | 0.68 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE2 | 14 | 0.65 | 0.33 | 0.68 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE3 | 14 | 0.65 | 0.33 | 0.68 |
| (1,2198) | 1:A:9:HIS:HB3 | 1:A:9:HIS:HD2 | 14 | 0.62 | 0.1 | 0.62 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB1 | 14 | 0.6 | 0.32 | 0.53 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB2 | 14 | 0.6 | 0.32 | 0.53 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB3 | 14 | 0.6 | 0.32 | 0.53 |
| (1,527) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HG2 | 14 | 0.24 | 0.12 | 0.18 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD21 | 13 | 1.58 | 0.8 | 2.14 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD22 | 13 | 1.58 | 0.8 | 2.14 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD23 | 13 | 1.58 | 0.8 | 2.14 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD21 | 13 | 1.58 | 0.8 | 2.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD22 | 13 | 1.58 | 0.8 | 2.14 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD23 | 13 | 1.58 | 0.8 | 2.14 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD21 | 13 | 1.58 | 0.8 | 2.14 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD22 | 13 | 1.58 | 0.8 | 2.14 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD23 | 13 | 1.58 | 0.8 | 2.14 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE2 | 13 | 1.47 | 0.81 | 1.91 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE3 | 13 | 1.47 | 0.81 | 1.91 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE2 | 13 | 1.47 | 0.81 | 1.91 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE3 | 13 | 1.47 | 0.81 | 1.91 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE2 | 13 | 1.47 | 0.81 | 1.91 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE3 | 13 | 1.47 | 0.81 | 1.91 |
| (1,1802) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:H | 13 | 1.05 | 0.52 | 1.34 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HB2 | 13 | 0.87 | 0.31 | 0.79 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HB2 | 13 | 0.87 | 0.31 | 0.79 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HB2 | 13 | 0.87 | 0.31 | 0.79 |
| (1,2140) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:106:GLN:HE22 | 13 | 0.55 | 0.42 | 0.57 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD1 | 1:A:65:MET:HG3 | 13 | 0.23 | 0.08 | 0.21 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD2 | 1:A:65:MET:HG3 | 13 | 0.23 | 0.08 | 0.21 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD21 | 12 | 1.62 | 0.28 | 1.6 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD22 | 12 | 1.62 | 0.28 | 1.6 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD23 | 12 | 1.62 | 0.28 | 1.6 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 12 | 1.56 | 0.31 | 1.46 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 12 | 1.56 | 0.31 | 1.46 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 12 | 1.56 | 0.31 | 1.46 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HD3 | 12 | 1.48 | 0.68 | 1.56 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HD3 | 12 | 1.48 | 0.68 | 1.56 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HD3 | 12 | 1.48 | 0.68 | 1.56 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:H | 12 | 1.3 | 0.28 | 1.34 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:H | 12 | 1.3 | 0.28 | 1.34 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:H | 12 | 1.3 | 0.28 | 1.34 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD11 | 12 | 1.3 | 0.24 | 1.35 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD12 | 12 | 1.3 | 0.24 | 1.35 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD13 | 12 | 1.3 | 0.24 | 1.35 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD11 | 12 | 1.17 | 0.23 | 1.19 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD12 | 12 | 1.17 | 0.23 | 1.19 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD13 | 12 | 1.17 | 0.23 | 1.19 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD11 | 12 | 1.17 | 0.23 | 1.19 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD12 | 12 | 1.17 | 0.23 | 1.19 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD13 | 12 | 1.17 | 0.23 | 1.19 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD11 | 12 | 1.17 | 0.23 | 1.19 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD12 | 12 | 1.17 | 0.23 | 1.19 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD13 | 12 | 1.17 | 0.23 | 1.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD21 | 12 | 1.11 | 0.31 | 0.98 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD22 | 12 | 1.11 | 0.31 | 0.98 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD23 | 12 | 1.11 | 0.31 | 0.98 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD11 | 12 | 1.1 | 0.44 | 1.14 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD12 | 12 | 1.1 | 0.44 | 1.14 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD13 | 12 | 1.1 | 0.44 | 1.14 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD21 | 1:A:100:THR:H | 12 | 1.0 | 0.23 | 0.91 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD22 | 1:A:100:THR:H | 12 | 1.0 | 0.23 | 0.91 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD23 | 1:A:100:THR:H | 12 | 1.0 | 0.23 | 0.91 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD11 | 12 | 0.95 | 0.46 | 0.93 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD12 | 12 | 0.95 | 0.46 | 0.93 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD13 | 12 | 0.95 | 0.46 | 0.93 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 0.62 | 0.34 | 0.55 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 0.62 | 0.34 | 0.55 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 0.62 | 0.34 | 0.55 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 0.62 | 0.34 | 0.55 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 0.62 | 0.34 | 0.55 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 0.62 | 0.34 | 0.55 |
| (1,521) | 1:A:68:MET:HG3 | 1:A:69:MET:H | 12 | 0.61 | 0.08 | 0.6 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG21 | 12 | 0.59 | 0.3 | 0.59 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG22 | 12 | 0.59 | 0.3 | 0.59 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG23 | 12 | 0.59 | 0.3 | 0.59 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 12 | 0.48 | 0.05 | 0.5 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 12 | 0.48 | 0.05 | 0.5 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 12 | 0.48 | 0.05 | 0.5 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB2 | 12 | 0.44 | 0.09 | 0.46 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB2 | 12 | 0.44 | 0.09 | 0.46 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB2 | 12 | 0.44 | 0.09 | 0.46 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB3 | 12 | 0.43 | 0.14 | 0.49 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB3 | 12 | 0.43 | 0.14 | 0.49 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB3 | 12 | 0.43 | 0.14 | 0.49 |
| (1,2116) | 1:A:105:LYS:H | 1:A:105:LYS:HG3 | 12 | 0.37 | 0.18 | 0.33 |
| (1,381) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HB2 | 12 | 0.24 | 0.1 | 0.22 |
| (1,1640) | 1:A:27:ASN:HA | 1:A:28:PRO:HD3 | 12 | 0.2 | 0.05 | 0.18 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD11 | 11 | 1.1 | 0.39 | 1.04 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD12 | 11 | 1.1 | 0.39 | 1.04 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD13 | 11 | 1.1 | 0.39 | 1.04 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD11 | 11 | 1.1 | 0.39 | 1.04 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD12 | 11 | 1.1 | 0.39 | 1.04 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD13 | 11 | 1.1 | 0.39 | 1.04 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD11 | 11 | 1.1 | 0.39 | 1.04 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD12 | 11 | 1.1 | 0.39 | 1.04 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD13 | 11 | 1.1 | 0.39 | 1.04 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE1 | 11 | 1.07 | 0.43 | 1.23 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE2 | 11 | 1.07 | 0.43 | 1.23 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE3 | 11 | 1.07 | 0.43 | 1.23 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD11 | 11 | 0.82 | 0.32 | 0.75 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD12 | 11 | 0.82 | 0.32 | 0.75 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD13 | 11 | 0.82 | 0.32 | 0.75 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB2 | 1:A:75:LEU:HB3 | 11 | 0.8 | 0.46 | 0.82 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB3 | 1:A:75:LEU:HB3 | 11 | 0.8 | 0.46 | 0.82 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 11 | 0.75 | 0.36 | 0.82 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 11 | 0.75 | 0.36 | 0.82 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 11 | 0.75 | 0.36 | 0.82 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 11 | 0.72 | 0.42 | 0.7 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 11 | 0.72 | 0.42 | 0.7 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 11 | 0.72 | 0.42 | 0.7 |
| (1,617) | 1:A:31:ILE:HG12 | 1:A:41:GLY:HA2 | 11 | 0.69 | 0.44 | 0.71 |
| (1,277) | 1:A:44:CYS:HB2 | 1:A:45:ASN:HD22 | 11 | 0.64 | 0.4 | 0.56 |
| (1,1976) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ASN:H | 11 | 0.46 | 0.22 | 0.56 |
| (1,216) | 1:A:114:ASP:HB2 | 1:A:115:LEU:HG | 11 | 0.33 | 0.13 | 0.29 |
| (1,661) | 1:A:98:GLN:HG3 | 1:A:109:THR:HB | 11 | 0.31 | 0.15 | 0.28 |
| (1,262) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:97:ASN:HD22 | 11 | 0.24 | 0.04 | 0.26 |
| (1,1977) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:80:ASN:HB3 | 11 | 0.23 | 0.05 | 0.23 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:HB2 | 10 | 1.95 | 0.29 | 2.09 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:HB2 | 10 | 1.95 | 0.29 | 2.09 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:HB2 | 10 | 1.95 | 0.29 | 2.09 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 10 | 1.66 | 0.31 | 1.76 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 10 | 1.66 | 0.31 | 1.76 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 10 | 1.66 | 0.31 | 1.76 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HA | 10 | 1.53 | 0.26 | 1.56 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HA | 10 | 1.53 | 0.26 | 1.56 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HA | 10 | 1.53 | 0.26 | 1.56 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG3 | 10 | 1.53 | 0.3 | 1.6 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG3 | 10 | 1.53 | 0.3 | 1.6 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG3 | 10 | 1.53 | 0.3 | 1.6 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:100:THR:H | 10 | 1.46 | 0.27 | 1.42 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:100:THR:H | 10 | 1.46 | 0.27 | 1.42 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:100:THR:H | 10 | 1.46 | 0.27 | 1.42 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB3 | 10 | 1.36 | 0.43 | 1.32 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB3 | 10 | 1.36 | 0.43 | 1.32 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB3 | 10 | 1.36 | 0.43 | 1.32 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:100:THR:H | 10 | 1.28 | 0.18 | 1.28 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:100:THR:H | 10 | 1.28 | 0.18 | 1.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:100:THR:H | 10 | 1.28 | 0.18 | 1.28 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG2 | 10 | 1.27 | 0.28 | 1.34 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG2 | 10 | 1.27 | 0.28 | 1.34 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG2 | 10 | 1.27 | 0.28 | 1.34 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG21 | 10 | 1.22 | 0.07 | 1.22 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG22 | 10 | 1.22 | 0.07 | 1.22 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG23 | 10 | 1.22 | 0.07 | 1.22 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:H | 10 | 1.15 | 0.15 | 1.18 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:H | 10 | 1.15 | 0.15 | 1.18 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:H | 10 | 1.15 | 0.15 | 1.18 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB2 | 10 | 1.1 | 0.3 | 1.11 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB2 | 10 | 1.1 | 0.3 | 1.11 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB2 | 10 | 1.1 | 0.3 | 1.11 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 10 | 1.02 | 0.21 | 1.12 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 10 | 1.02 | 0.21 | 1.12 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 10 | 1.02 | 0.21 | 1.12 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG21 | 10 | 1.02 | 0.07 | 1.04 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG22 | 10 | 1.02 | 0.07 | 1.04 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG23 | 10 | 1.02 | 0.07 | 1.04 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 10 | 0.93 | 0.11 | 0.92 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 10 | 0.93 | 0.11 | 0.92 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 10 | 0.93 | 0.11 | 0.92 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD21 | 10 | 0.89 | 0.17 | 0.84 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD22 | 10 | 0.89 | 0.17 | 0.84 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD23 | 10 | 0.89 | 0.17 | 0.84 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:31:ILE:H | 10 | 0.74 | 0.16 | 0.75 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:31:ILE:H | 10 | 0.74 | 0.16 | 0.75 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:31:ILE:H | 10 | 0.74 | 0.16 | 0.75 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB1 | 10 | 0.74 | 0.21 | 0.75 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB2 | 10 | 0.74 | 0.21 | 0.75 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB3 | 10 | 0.74 | 0.21 | 0.75 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB1 | 10 | 0.74 | 0.21 | 0.75 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB2 | 10 | 0.74 | 0.21 | 0.75 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB3 | 10 | 0.74 | 0.21 | 0.75 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB1 | 10 | 0.74 | 0.21 | 0.75 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB2 | 10 | 0.74 | 0.21 | 0.75 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB3 | 10 | 0.74 | 0.21 | 0.75 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG21 | 10 | 0.69 | 0.21 | 0.7 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG22 | 10 | 0.69 | 0.21 | 0.7 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG23 | 10 | 0.69 | 0.21 | 0.7 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:93:ASP:H | 10 | 0.67 | 0.08 | 0.69 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:93:ASP:H | 10 | 0.67 | 0.08 | 0.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:93:ASP:H | 10 | 0.67 | 0.08 | 0.69 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD11 | 10 | 0.66 | 0.36 | 0.69 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD12 | 10 | 0.66 | 0.36 | 0.69 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD13 | 10 | 0.66 | 0.36 | 0.69 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 10 | 0.66 | 0.36 | 0.69 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 10 | 0.66 | 0.36 | 0.69 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 10 | 0.66 | 0.36 | 0.69 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD11 | 10 | 0.65 | 0.14 | 0.64 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD12 | 10 | 0.65 | 0.14 | 0.64 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD13 | 10 | 0.65 | 0.14 | 0.64 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD11 | 10 | 0.65 | 0.14 | 0.64 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD12 | 10 | 0.65 | 0.14 | 0.64 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD13 | 10 | 0.65 | 0.14 | 0.64 |
| (1,588) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:85:MET:H | 10 | 0.6 | 0.17 | 0.6 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG21 | 10 | 0.57 | 0.06 | 0.58 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG22 | 10 | 0.57 | 0.06 | 0.58 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG23 | 10 | 0.57 | 0.06 | 0.58 |
| (1,577) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HB3 | 10 | 0.53 | 0.1 | 0.55 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD11 | 10 | 0.5 | 0.18 | 0.56 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD12 | 10 | 0.5 | 0.18 | 0.56 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD13 | 10 | 0.5 | 0.18 | 0.56 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD11 | 10 | 0.5 | 0.18 | 0.56 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD12 | 10 | 0.5 | 0.18 | 0.56 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD13 | 10 | 0.5 | 0.18 | 0.56 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD11 | 10 | 0.5 | 0.18 | 0.56 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD12 | 10 | 0.5 | 0.18 | 0.56 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD13 | 10 | 0.5 | 0.18 | 0.56 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 10 | 0.49 | 0.04 | 0.5 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 10 | 0.49 | 0.04 | 0.5 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 10 | 0.49 | 0.04 | 0.5 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD11 | 10 | 0.46 | 0.17 | 0.56 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD12 | 10 | 0.46 | 0.17 | 0.56 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD13 | 10 | 0.46 | 0.17 | 0.56 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 10 | 0.43 | 0.07 | 0.44 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 10 | 0.43 | 0.07 | 0.44 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 10 | 0.43 | 0.07 | 0.44 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:98:GLN:HA | 10 | 0.42 | 0.18 | 0.38 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:98:GLN:HA | 10 | 0.42 | 0.18 | 0.38 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:98:GLN:HA | 10 | 0.42 | 0.18 | 0.38 |
| (1,1188) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:84:GLU:HB2 | 10 | 0.42 | 0.23 | 0.39 |
| (1,747) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HG | 10 | 0.39 | 0.24 | 0.3 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 10 | 0.37 | 0.18 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 10 | 0.37 | 0.18 | 0.31 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 10 | 0.37 | 0.18 | 0.31 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 10 | 0.37 | 0.18 | 0.31 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 10 | 0.37 | 0.18 | 0.31 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 10 | 0.37 | 0.18 | 0.31 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD21 | 10 | 0.33 | 0.28 | 0.14 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD22 | 10 | 0.33 | 0.28 | 0.14 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD23 | 10 | 0.33 | 0.28 | 0.14 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD21 | 10 | 0.33 | 0.28 | 0.14 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD22 | 10 | 0.33 | 0.28 | 0.14 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD23 | 10 | 0.33 | 0.28 | 0.14 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD21 | 10 | 0.33 | 0.28 | 0.14 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD22 | 10 | 0.33 | 0.28 | 0.14 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD23 | 10 | 0.33 | 0.28 | 0.14 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HA | 10 | 0.28 | 0.02 | 0.29 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HA | 10 | 0.28 | 0.02 | 0.29 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HA | 10 | 0.28 | 0.02 | 0.29 |
| (1,81) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:110:TYR:HB2 | 10 | 0.2 | 0.03 | 0.22 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD11 | 1:A:87:LYS:HA | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD12 | 1:A:87:LYS:HA | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD13 | 1:A:87:LYS:HA | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD21 | 1:A:87:LYS:HA | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD22 | 1:A:87:LYS:HA | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD23 | 1:A:87:LYS:HA | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,2091) | 1:A:91:GLN:HE22 | 1:A:103:THR:HA | 9 | 1.4 | 0.3 | 1.35 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG11 | 9 | 1.21 | 0.35 | 1.25 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG12 | 9 | 1.21 | 0.35 | 1.25 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG13 | 9 | 1.21 | 0.35 | 1.25 |
| (1,2130) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:7:LEU:HG | 9 | 0.79 | 0.32 | 0.9 |
| (1,209) | 1:A:113:ALA:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 9 | 0.6 | 0.3 | 0.61 |
| (1,1792) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 9 | 0.6 | 0.33 | 0.47 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:H | 9 | 0.55 | 0.16 | 0.55 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:H | 9 | 0.55 | 0.16 | 0.55 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:H | 9 | 0.55 | 0.16 | 0.55 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD21 | 1:A:109:THR:H | 9 | 0.51 | 0.27 | 0.58 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD22 | 1:A:109:THR:H | 9 | 0.51 | 0.27 | 0.58 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD23 | 1:A:109:THR:H | 9 | 0.51 | 0.27 | 0.58 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 9 | 0.51 | 0.12 | 0.55 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 9 | 0.51 | 0.12 | 0.55 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 9 | 0.51 | 0.12 | 0.55 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD11 | 9 | 0.41 | 0.18 | 0.35 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD12 | 9 | 0.41 | 0.18 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD13 | 9 | 0.41 | 0.18 | 0.35 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD21 | 9 | 0.37 | 0.22 | 0.29 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD22 | 9 | 0.37 | 0.22 | 0.29 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD23 | 9 | 0.37 | 0.22 | 0.29 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 9 | 0.37 | 0.22 | 0.29 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 9 | 0.37 | 0.22 | 0.29 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 9 | 0.37 | 0.22 | 0.29 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 9 | 0.37 | 0.22 | 0.29 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 9 | 0.37 | 0.22 | 0.29 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 9 | 0.37 | 0.22 | 0.29 |
| (1,407) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:74:GLN:HE22 | 9 | 0.32 | 0.16 | 0.29 |
| (1,515) | 1:A:73:PRO:HB3 | 1:A:74:GLN:H | 9 | 0.32 | 0.1 | 0.32 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD11 | 9 | 0.3 | 0.07 | 0.32 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD12 | 9 | 0.3 | 0.07 | 0.32 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD13 | 9 | 0.3 | 0.07 | 0.32 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD21 | 9 | 0.3 | 0.07 | 0.32 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD22 | 9 | 0.3 | 0.07 | 0.32 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD23 | 9 | 0.3 | 0.07 | 0.32 |
| (1,1278) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:HA | 9 | 0.27 | 0.15 | 0.2 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD21 | 8 | 1.49 | 0.46 | 1.32 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD22 | 8 | 1.49 | 0.46 | 1.32 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD23 | 8 | 1.49 | 0.46 | 1.32 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:81:THR:H | 8 | 1.3 | 0.2 | 1.26 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:81:THR:H | 8 | 1.3 | 0.2 | 1.26 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:81:THR:H | 8 | 1.3 | 0.2 | 1.26 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 8 | 1.26 | 0.14 | 1.24 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 8 | 1.26 | 0.14 | 1.24 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 8 | 1.26 | 0.14 | 1.24 |
| (1,310) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:111:LYS:HG3 | 8 | 1.19 | 0.59 | 1.42 |
| (1,1174) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HG3 | 8 | 1.09 | 0.35 | 1.23 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:81:THR:HB | 8 | 0.93 | 0.25 | 0.9 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:81:THR:HB | 8 | 0.93 | 0.25 | 0.9 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:81:THR:HB | 8 | 0.93 | 0.25 | 0.9 |
| (1,608) | 1:A:98:GLN:HA | 1:A:111:LYS:HD2 | 8 | 0.89 | 0.37 | 0.84 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD11 | 8 | 0.85 | 0.04 | 0.86 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD12 | 8 | 0.85 | 0.04 | 0.86 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD13 | 8 | 0.85 | 0.04 | 0.86 |
| (1,880) | 1:A:98:GLN:HA | 1:A:111:LYS:HG3 | 8 | 0.62 | 0.3 | 0.58 |
| (1,1940) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HG3 | 8 | 0.52 | 0.23 | 0.45 |
| (1,63) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 8 | 0.52 | 0.3 | 0.43 |
| (1,63) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 8 | 0.52 | 0.3 | 0.43 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 8 | 0.45 | 0.16 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 8 | 0.45 | 0.16 | 0.41 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 8 | 0.45 | 0.16 | 0.41 |
| (1,638) | 1:A:26:LYS:HA | 1:A:26:LYS:HD3 | 8 | 0.42 | 0.26 | 0.34 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 8 | 0.42 | 0.4 | 0.2 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 8 | 0.42 | 0.4 | 0.2 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 8 | 0.42 | 0.4 | 0.2 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD21 | 8 | 0.42 | 0.4 | 0.2 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD22 | 8 | 0.42 | 0.4 | 0.2 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD23 | 8 | 0.42 | 0.4 | 0.2 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 8 | 0.41 | 0.18 | 0.44 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 8 | 0.41 | 0.18 | 0.44 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 8 | 0.41 | 0.18 | 0.44 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:101:LEU:HG | 8 | 0.4 | 0.16 | 0.38 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:101:LEU:HG | 8 | 0.4 | 0.16 | 0.38 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:101:LEU:HG | 8 | 0.4 | 0.16 | 0.38 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:82:ILE:H | 8 | 0.36 | 0.16 | 0.36 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:82:ILE:H | 8 | 0.36 | 0.16 | 0.36 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:82:ILE:H | 8 | 0.36 | 0.16 | 0.36 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 8 | 0.35 | 0.14 | 0.32 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 8 | 0.35 | 0.14 | 0.32 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 8 | 0.35 | 0.14 | 0.32 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 8 | 0.35 | 0.14 | 0.32 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 8 | 0.35 | 0.14 | 0.32 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 8 | 0.35 | 0.14 | 0.32 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD11 | 8 | 0.33 | 0.17 | 0.24 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD12 | 8 | 0.33 | 0.17 | 0.24 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD13 | 8 | 0.33 | 0.17 | 0.24 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HG2 | 8 | 0.31 | 0.21 | 0.16 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HG2 | 8 | 0.31 | 0.21 | 0.16 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HG2 | 8 | 0.31 | 0.21 | 0.16 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG21 | 8 | 0.28 | 0.05 | 0.3 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG22 | 8 | 0.28 | 0.05 | 0.3 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG23 | 8 | 0.28 | 0.05 | 0.3 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG21 | 8 | 0.28 | 0.05 | 0.3 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG22 | 8 | 0.28 | 0.05 | 0.3 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG23 | 8 | 0.28 | 0.05 | 0.3 |
| (1,909) | 1:A:111:LYS:HG3 | 1:A:112:LEU:H | 8 | 0.27 | 0.09 | 0.31 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD21 | 8 | 0.2 | 0.1 | 0.18 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD22 | 8 | 0.2 | 0.1 | 0.18 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD23 | 8 | 0.2 | 0.1 | 0.18 |
| (1,629) | 1:A:82:ILE:HG12 | 1:A:83:SER:H | 8 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,582) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HB3 | 8 | 0.15 | 0.04 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,651) | 1:A:95:THR:HB | 1:A:98:GLN:HB2 | 7 | 1.23 | 0.24 | 1.22 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 7 | 0.84 | 0.16 | 0.84 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 7 | 0.84 | 0.16 | 0.84 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 7 | 0.84 | 0.16 | 0.84 |
| (1,458) | 1:A:69:MET:H | 1:A:69:MET:HB2 | 7 | 0.75 | 0.05 | 0.74 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD21 | 7 | 0.74 | 0.45 | 0.59 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD22 | 7 | 0.74 | 0.45 | 0.59 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD23 | 7 | 0.74 | 0.45 | 0.59 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE1 | 1:A:117:ASN:HB3 | 7 | 0.61 | 0.38 | 0.42 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE2 | 1:A:117:ASN:HB3 | 7 | 0.61 | 0.38 | 0.42 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE3 | 1:A:117:ASN:HB3 | 7 | 0.61 | 0.38 | 0.42 |
| (1,848) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:84:GLU:HB2 | 7 | 0.44 | 0.32 | 0.33 |
| (1,230) | 1:A:70:CYS:HB3 | 1:A:76:ASN:H | 7 | 0.41 | 0.19 | 0.38 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:95:THR:H | 7 | 0.27 | 0.09 | 0.27 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:95:THR:H | 7 | 0.27 | 0.09 | 0.27 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:95:THR:H | 7 | 0.27 | 0.09 | 0.27 |
| (1,359) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:111:LYS:HB2 | 7 | 0.24 | 0.1 | 0.24 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:106:GLN:HB3 | 7 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:106:GLN:HB3 | 7 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:106:GLN:HB3 | 7 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,440) | 1:A:68:MET:HB3 | 1:A:69:MET:HA | 6 | 1.16 | 0.06 | 1.15 |
| (1,300) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 6 | 0.79 | 0.33 | 0.78 |
| (1,456) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:68:MET:HB2 | 6 | 0.75 | 0.12 | 0.75 |
| (1,311) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:111:LYS:H | 6 | 0.74 | 0.27 | 0.89 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 6 | 0.49 | 0.2 | 0.42 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 6 | 0.49 | 0.2 | 0.42 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 6 | 0.49 | 0.2 | 0.42 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD21 | 6 | 0.48 | 0.38 | 0.24 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD22 | 6 | 0.48 | 0.38 | 0.24 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD23 | 6 | 0.48 | 0.38 | 0.24 |
| (1,698) | 1:A:42:SER:HB2 | 1:A:46:ARG:HG3 | 6 | 0.44 | 0.21 | 0.42 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 6 | 0.43 | 0.33 | 0.28 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 6 | 0.43 | 0.33 | 0.28 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 6 | 0.43 | 0.33 | 0.28 |
| (1,1711) | 1:A:39:ILE:H | 1:A:51:GLY:HA2 | 6 | 0.38 | 0.11 | 0.41 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB1 | 6 | 0.38 | 0.06 | 0.39 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB2 | 6 | 0.38 | 0.06 | 0.39 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB3 | 6 | 0.38 | 0.06 | 0.39 |
| (1,1803) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:67:ARG:HA | 6 | 0.38 | 0.08 | 0.42 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:6:GLN:HE21 | 6 | 0.35 | 0.23 | 0.26 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:6:GLN:HE21 | 6 | 0.35 | 0.23 | 0.26 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:6:GLN:HE21 | 6 | 0.35 | 0.23 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,165) | 1:A:45:ASN:HB2 | 1:A:67:ARG:HA | 6 | 0.35 | 0.26 | 0.25 |
| (1,354) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG3 | 6 | 0.32 | 0.13 | 0.34 |
| (1,285) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:55:ASN:HD22 | 6 | 0.29 | 0.04 | 0.3 |
| (1,1979) | 1:A:83:SER:H | 1:A:83:SER:HB3 | 6 | 0.23 | 0.04 | 0.24 |
| (1,228) | 1:A:70:CYS:H | 1:A:70:CYS:HB3 | 6 | 0.19 | 0.03 | 0.18 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG11 | 6 | 0.18 | 0.07 | 0.17 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG12 | 6 | 0.18 | 0.07 | 0.17 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG13 | 6 | 0.18 | 0.07 | 0.17 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG11 | 6 | 0.18 | 0.07 | 0.17 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG12 | 6 | 0.18 | 0.07 | 0.17 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG13 | 6 | 0.18 | 0.07 | 0.17 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG11 | 6 | 0.18 | 0.07 | 0.17 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG12 | 6 | 0.18 | 0.07 | 0.17 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG13 | 6 | 0.18 | 0.07 | 0.17 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD11 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD12 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD13 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD21 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD22 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD23 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD11 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD12 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD13 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD21 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD22 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD23 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD11 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD12 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD13 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD21 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD22 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD23 | 6 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,432) | 1:A:92:VAL:HB | 1:A:99:LEU:HD21 | 5 | 0.73 | 0.45 | 0.53 |
| (1,432) | 1:A:92:VAL:HB | 1:A:99:LEU:HD22 | 5 | 0.73 | 0.45 | 0.53 |
| (1,432) | 1:A:92:VAL:HB | 1:A:99:LEU:HD23 | 5 | 0.73 | 0.45 | 0.53 |
| (1,270) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:45:ASN:HD22 | 5 | 0.57 | 0.43 | 0.56 |
| (1,2098) | 1:A:72:ASN:HD21 | 1:A:74:GLN:HB2 | 5 | 0.57 | 0.29 | 0.48 |
| (1,887) | 1:A:20:LYS:HG2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 5 | 0.51 | 0.24 | 0.65 |
| (1,2074) | 1:A:26:LYS:HB2 | 1:A:27:ASN:HD22 | 5 | 0.5 | 0.22 | 0.63 |
| (1,1089) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HG21 | 5 | 0.47 | 0.31 | 0.51 |
| (1,1089) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HG22 | 5 | 0.47 | 0.31 | 0.51 |
| (1,1089) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HG23 | 5 | 0.47 | 0.31 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,345) | 1:A:84:GLU:HG2 | 1:A:85:MET:H | 5 | 0.45 | 0.18 | 0.44 |
| (1,410) | 1:A:74:GLN:HG2 | 1:A:78:LEU:HD21 | 5 | 0.39 | 0.1 | 0.44 |
| (1,410) | 1:A:74:GLN:HG2 | 1:A:78:LEU:HD22 | 5 | 0.39 | 0.1 | 0.44 |
| (1,410) | 1:A:74:GLN:HG2 | 1:A:78:LEU:HD23 | 5 | 0.39 | 0.1 | 0.44 |
| (1,595) | 1:A:77:GLU:HB2 | 1:A:78:LEU:H | 5 | 0.39 | 0.1 | 0.37 |
| (1,1081) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD21 | 5 | 0.36 | 0.1 | 0.42 |
| (1,1081) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD22 | 5 | 0.36 | 0.1 | 0.42 |
| (1,1081) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD23 | 5 | 0.36 | 0.1 | 0.42 |
| (1,948) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:98:GLN:H | 5 | 0.35 | 0.19 | 0.31 |
| (1,948) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:98:GLN:H | 5 | 0.35 | 0.19 | 0.31 |
| (1,948) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:98:GLN:H | 5 | 0.35 | 0.19 | 0.31 |
| (1,825) | 1:A:84:GLU:HA | 1:A:87:LYS:HG2 | 5 | 0.27 | 0.12 | 0.28 |
| (1,1060) | 1:A:46:ARG:HB3 | 1:A:66:THR:HG21 | 5 | 0.27 | 0.24 | 0.17 |
| (1,1060) | 1:A:46:ARG:HB3 | 1:A:66:THR:HG22 | 5 | 0.27 | 0.24 | 0.17 |
| (1,1060) | 1:A:46:ARG:HB3 | 1:A:66:THR:HG23 | 5 | 0.27 | 0.24 | 0.17 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 5 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1164) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:30:GLU:HA | 5 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1164) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:30:GLU:HA | 5 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1164) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:30:GLU:HA | 5 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1800) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:95:THR:H | 5 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1800) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:95:THR:H | 5 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1800) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:95:THR:H | 5 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,516) | 1:A:57:GLU:HB2 | 1:A:91:GLN:HE22 | 4 | 1.62 | 0.14 | 1.66 |
| (1,1699) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:H | 4 | 1.37 | 0.19 | 1.36 |
| (1,1699) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:H | 4 | 1.37 | 0.19 | 1.36 |
| (1,1699) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:H | 4 | 1.37 | 0.19 | 1.36 |
| (1,1710) | 1:A:39:ILE:H | 1:A:48:SER:HB2 | 4 | 1.18 | 0.35 | 1.12 |
| (1,686) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:29:PRO:HB3 | 4 | 1.14 | 0.31 | 1.14 |
| (1,686) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:29:PRO:HB3 | 4 | 1.14 | 0.31 | 1.14 |
| (1,686) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:29:PRO:HB3 | 4 | 1.14 | 0.31 | 1.14 |
| (1,1098) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:16:SER:H | 4 | 1.13 | 0.12 | 1.16 |
| (1,1098) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:16:SER:H | 4 | 1.13 | 0.12 | 1.16 |
| (1,1098) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:16:SER:H | 4 | 1.13 | 0.12 | 1.16 |
| (1,1096) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:15:GLU:H | 4 | 1.12 | 0.12 | 1.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1096) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:15:GLU:H | 4 | 1.12 | 0.12 | 1.18 |
| (1,1096) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:15:GLU:H | 4 | 1.12 | 0.12 | 1.18 |
| (1,1100) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HA | 4 | 1.1 | 0.2 | 1.06 |
| (1,1100) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HA | 4 | 1.1 | 0.2 | 1.06 |
| (1,1100) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HA | 4 | 1.1 | 0.2 | 1.06 |
| (1,1782) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:H | 4 | 1.0 | 0.12 | 1.04 |
| (1,1782) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:H | 4 | 1.0 | 0.12 | 1.04 |
| (1,1782) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:H | 4 | 1.0 | 0.12 | 1.04 |
| (1,692) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:29:PRO:HA | 4 | 0.95 | 0.29 | 1.05 |
| (1,692) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:29:PRO:HA | 4 | 0.95 | 0.29 | 1.05 |
| (1,692) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:29:PRO:HA | 4 | 0.95 | 0.29 | 1.05 |
| (1,1972) | 1:A:8:GLN:HG2 | 1:A:35:GLU:H | 4 | 0.92 | 0.45 | 0.98 |
| (1,688) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:29:PRO:HB2 | 4 | 0.9 | 0.29 | 0.86 |
| (1,688) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:29:PRO:HB2 | 4 | 0.9 | 0.29 | 0.86 |
| (1,688) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:29:PRO:HB2 | 4 | 0.9 | 0.29 | 0.86 |
| (1,1095) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:H | 4 | 0.84 | 0.3 | 0.86 |
| (1,1095) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:H | 4 | 0.84 | 0.3 | 0.86 |
| (1,1095) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:H | 4 | 0.84 | 0.3 | 0.86 |
| (1,1103) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:109:THR:HB | 4 | 0.83 | 0.21 | 0.79 |
| (1,1103) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:109:THR:HB | 4 | 0.83 | 0.21 | 0.79 |
| (1,1103) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:109:THR:HB | 4 | 0.83 | 0.21 | 0.79 |
| (1,2158) | 1:A:48:SER:HB2 | 1:A:49:GLY:H | 4 | 0.8 | 0.2 | 0.8 |
| (1,405) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:78:LEU:HD21 | 4 | 0.79 | 0.27 | 0.8 |
| (1,405) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:78:LEU:HD22 | 4 | 0.79 | 0.27 | 0.8 |
| (1,405) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:78:LEU:HD23 | 4 | 0.79 | 0.27 | 0.8 |
| (1,472) | 1:A:26:LYS:HB2 | 1:A:27:ASN:HD21 | 4 | 0.74 | 0.14 | 0.81 |
| (1,2141) | 1:A:106:GLN:HE21 | 1:A:108:LEU:HD21 | 4 | 0.71 | 0.38 | 0.62 |
| (1,2141) | 1:A:106:GLN:HE21 | 1:A:108:LEU:HD22 | 4 | 0.71 | 0.38 | 0.62 |
| (1,2141) | 1:A:106:GLN:HE21 | 1:A:108:LEU:HD23 | 4 | 0.71 | 0.38 | 0.62 |
| (1,286) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:57:GLU:HB2 | 4 | 0.66 | 0.33 | 0.58 |
| (1,607) | 1:A:8:GLN:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 4 | 0.65 | 0.32 | 0.78 |
| (1,1097) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:109:THR:H | 4 | 0.64 | 0.14 | 0.62 |
| (1,1097) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:109:THR:H | 4 | 0.64 | 0.14 | 0.62 |
| (1,1097) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:109:THR:H | 4 | 0.64 | 0.14 | 0.62 |
| (1,1917) | 1:A:24:SER:HB2 | 1:A:26:LYS:H | 4 | 0.6 | 0.28 | 0.62 |
| (1,1401) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HB3 | 4 | 0.57 | 0.43 | 0.48 |
| (1,1401) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HB3 | 4 | 0.57 | 0.43 | 0.48 |
| (1,1401) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HB3 | 4 | 0.57 | 0.43 | 0.48 |
| (1,2041) | 1:A:7:LEU:H | 1:A:8:GLN:HG3 | 4 | 0.5 | 0.06 | 0.52 |
| (1,798) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:78:LEU:HD21 | 4 | 0.5 | 0.36 | 0.37 |
| (1,798) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:78:LEU:HD22 | 4 | 0.5 | 0.36 | 0.37 |
| (1,798) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:78:LEU:HD23 | 4 | 0.5 | 0.36 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,182) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:45:ASN:HB3 | 4 | 0.46 | 0.48 | 0.2 |
| (1,590) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:105:LYS:HE2 | 4 | 0.44 | 0.29 | 0.37 |
| (1,590) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:105:LYS:HE3 | 4 | 0.44 | 0.29 | 0.37 |
| (1,1102) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HD11 | 4 | 0.41 | 0.04 | 0.39 |
| (1,1102) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HD12 | 4 | 0.41 | 0.04 | 0.39 |
| (1,1102) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HD13 | 4 | 0.41 | 0.04 | 0.39 |
| (1,177) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:13:VAL:H | 4 | 0.38 | 0.15 | 0.45 |
| (1,1754) | 1:A:101:LEU:H | 1:A:108:LEU:HD11 | 4 | 0.36 | 0.11 | 0.36 |
| (1,1754) | 1:A:101:LEU:H | 1:A:108:LEU:HD12 | 4 | 0.36 | 0.11 | 0.36 |
| (1,1754) | 1:A:101:LEU:H | 1:A:108:LEU:HD13 | 4 | 0.36 | 0.11 | 0.36 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:108:LEU:HD21 | 4 | 0.34 | 0.1 | 0.36 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:108:LEU:HD22 | 4 | 0.34 | 0.1 | 0.36 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:108:LEU:HD23 | 4 | 0.34 | 0.1 | 0.36 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:108:LEU:HD21 | 4 | 0.34 | 0.1 | 0.36 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:108:LEU:HD22 | 4 | 0.34 | 0.1 | 0.36 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:108:LEU:HD23 | 4 | 0.34 | 0.1 | 0.36 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:108:LEU:HD21 | 4 | 0.34 | 0.1 | 0.36 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:108:LEU:HD22 | 4 | 0.34 | 0.1 | 0.36 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:108:LEU:HD23 | 4 | 0.34 | 0.1 | 0.36 |
| (1,609) | 1:A:111:LYS:HG3 | 1:A:111:LYS:HD2 | 4 | 0.31 | 0.09 | 0.36 |
| (1,874) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:H | 4 | 0.28 | 0.09 | 0.27 |
| (1,874) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:H | 4 | 0.28 | 0.09 | 0.27 |
| (1,874) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:H | 4 | 0.28 | 0.09 | 0.27 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD11 | 4 | 0.28 | 0.14 | 0.22 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD12 | 4 | 0.28 | 0.14 | 0.22 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD13 | 4 | 0.28 | 0.14 | 0.22 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD11 | 4 | 0.28 | 0.14 | 0.22 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD12 | 4 | 0.28 | 0.14 | 0.22 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD13 | 4 | 0.28 | 0.14 | 0.22 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD11 | 4 | 0.28 | 0.14 | 0.22 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD12 | 4 | 0.28 | 0.14 | 0.22 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD13 | 4 | 0.28 | 0.14 | 0.22 |
| (1,1969) | 1:A:27:ASN:H | 1:A:27:ASN:HB2 | 4 | 0.27 | 0.06 | 0.26 |
| (1,1132) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:14:LEU:H | 4 | 0.25 | 0.14 | 0.19 |
| (1,1132) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:14:LEU:H | 4 | 0.25 | 0.14 | 0.19 |
| (1,1132) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:14:LEU:H | 4 | 0.25 | 0.14 | 0.19 |
| (1,468) | 1:A:26:LYS:HB2 | 1:A:27:ASN:H | 4 | 0.24 | 0.07 | 0.26 |
| (1,255) | 1:A:96:ALA:HB1 | 1:A:97:ASN:HB2 | 4 | 0.21 | 0.05 | 0.2 |
| (1,255) | 1:A:96:ALA:HB2 | 1:A:97:ASN:HB2 | 4 | 0.21 | 0.05 | 0.2 |
| (1,255) | 1:A:96:ALA:HB3 | 1:A:97:ASN:HB2 | 4 | 0.21 | 0.05 | 0.2 |
| (1,2060) | 1:A:8:GLN:H | 1:A:8:GLN:HG3 | 4 | 0.2 | 0.12 | 0.13 |
| (1,1874) | 1:A:110:TYR:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 4 | 0.18 | 0.07 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1988) | 1:A:105:LYS:HG2 | 1:A:106:GLN:H | 4 | 0.15 | 0.01 | 0.16 |
| (1,2139) | 1:A:61:LYS:HB2 | 1:A:62:GLY:H | 4 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:HG21 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:HG22 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:HG23 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:HG21 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:HG22 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:HG23 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:HG21 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:HG22 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:HG23 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:92:VAL:HG21 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:92:VAL:HG22 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:92:VAL:HG23 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:92:VAL:HG21 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:92:VAL:HG22 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:92:VAL:HG23 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:92:VAL:HG21 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:92:VAL:HG22 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:92:VAL:HG23 | 4 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB2 | 1:A:26:LYS:HG2 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB2 | 1:A:26:LYS:HG3 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB3 | 1:A:26:LYS:HG2 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB3 | 1:A:26:LYS:HG3 | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,436) | 1:A:68:MET:H | 1:A:68:MET:HB2 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,775) | 1:A:94:LEU:HD21 | 1:A:95:THR:HA | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,775) | 1:A:94:LEU:HD22 | 1:A:95:THR:HA | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,775) | 1:A:94:LEU:HD23 | 1:A:95:THR:HA | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1410) | 1:A:88:GLU:HA | 1:A:103:THR:HG21 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1410) | 1:A:88:GLU:HA | 1:A:103:THR:HG22 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1410) | 1:A:88:GLU:HA | 1:A:103:THR:HG23 | 4 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HD11 | 3 | 0.86 | 0.2 | 0.74 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HD12 | 3 | 0.86 | 0.2 | 0.74 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HD13 | 3 | 0.86 | 0.2 | 0.74 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HD11 | 3 | 0.86 | 0.2 | 0.74 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HD12 | 3 | 0.86 | 0.2 | 0.74 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HD13 | 3 | 0.86 | 0.2 | 0.74 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HD11 | 3 | 0.86 | 0.2 | 0.74 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HD12 | 3 | 0.86 | 0.2 | 0.74 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HD13 | 3 | 0.86 | 0.2 | 0.74 |
| (1,794) | 1:A:70:CYS:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 3 | 0.81 | 0.26 | 0.73 |
| (1,794) | 1:A:70:CYS:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 3 | 0.81 | 0.26 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,794) | 1:A:70:CYS:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 3 | 0.81 | 0.26 | 0.73 |
| (1,1724) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:106:GLN:HE22 | 3 | 0.76 | 0.38 | 0.55 |
| (1,104) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HG3 | 3 | 0.74 | 0.17 | 0.74 |
| (1,601) | 1:A:5:GLU:HA | 1:A:8:GLN:HB2 | 3 | 0.73 | 0.06 | 0.77 |
| (1,542) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:65:MET:HG3 | 3 | 0.55 | 0.33 | 0.36 |
| (1,542) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:65:MET:HG3 | 3 | 0.55 | 0.33 | 0.36 |
| (1,542) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:65:MET:HG3 | 3 | 0.55 | 0.33 | 0.36 |
| (1,264) | 1:A:80:ASN:HB3 | 1:A:81:THR:HA | 3 | 0.52 | 0.11 | 0.56 |
| (1,660) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HB | 3 | 0.52 | 0.28 | 0.49 |
| (1,762) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:67:ARG:HG3 | 3 | 0.43 | 0.02 | 0.43 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD11 | 3 | 0.41 | 0.07 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD12 | 3 | 0.41 | 0.07 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD13 | 3 | 0.41 | 0.07 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD11 | 3 | 0.41 | 0.07 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD12 | 3 | 0.41 | 0.07 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD13 | 3 | 0.41 | 0.07 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD11 | 3 | 0.41 | 0.07 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD12 | 3 | 0.41 | 0.07 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD13 | 3 | 0.41 | 0.07 | 0.36 |
| (1,1939) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:68:MET:HG3 | 3 | 0.39 | 0.26 | 0.23 |
| (1,356) | 1:A:5:GLU:HA | 1:A:8:GLN:HG3 | 3 | 0.37 | 0.19 | 0.35 |
| (1,263) | 1:A:80:ASN:HB3 | 1:A:81:THR:H | 3 | 0.36 | 0.13 | 0.4 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 3 | 0.35 | 0.16 | 0.36 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 3 | 0.35 | 0.16 | 0.36 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 3 | 0.35 | 0.16 | 0.36 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 3 | 0.35 | 0.16 | 0.36 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 3 | 0.35 | 0.16 | 0.36 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 3 | 0.35 | 0.16 | 0.36 |
| (1,339) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:GLY:H | 3 | 0.33 | 0.0 | 0.33 |
| (1,1920) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:45:ASN:HD22 | 3 | 0.33 | 0.12 | 0.37 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD11 | 3 | 0.3 | 0.11 | 0.25 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD12 | 3 | 0.3 | 0.11 | 0.25 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD13 | 3 | 0.3 | 0.11 | 0.25 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD11 | 3 | 0.3 | 0.11 | 0.25 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD12 | 3 | 0.3 | 0.11 | 0.25 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD13 | 3 | 0.3 | 0.11 | 0.25 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD11 | 3 | 0.3 | 0.11 | 0.25 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD12 | 3 | 0.3 | 0.11 | 0.25 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD13 | 3 | 0.3 | 0.11 | 0.25 |
| (1,1911) | 1:A:98:GLN:H | 1:A:98:GLN:HG3 | 3 | 0.3 | 0.2 | 0.17 |
| (1,321) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:91:GLN:HA | 3 | 0.25 | 0.06 | 0.27 |
| (1,2199) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:9:HIS:HD2 | 3 | 0.24 | 0.0 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,950) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:97:ASN:HA | 3 | 0.19 | 0.04 | 0.17 |
| (1,950) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:97:ASN:HA | 3 | 0.19 | 0.04 | 0.17 |
| (1,950) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:97:ASN:HA | 3 | 0.19 | 0.04 | 0.17 |
| (1,1812) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 3 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (1,222) | 1:A:39:ILE:HB | 1:A:51:GLY:HA2 | 3 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (1,398) | 1:A:85:MET:HB3 | 1:A:86:LEU:H | 3 | 0.16 | 0.01 | 0.15 |
| (1,666) | 1:A:3:THR:HB | 1:A:4:PRO:HG3 | 3 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (1,180) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:H | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,506) | 1:A:68:MET:H | 1:A:68:MET:HG2 | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG21 | 1:A:96:ALA:HB1 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG21 | 1:A:96:ALA:HB2 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG21 | 1:A:96:ALA:HB3 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG22 | 1:A:96:ALA:HB1 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG22 | 1:A:96:ALA:HB2 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG22 | 1:A:96:ALA:HB3 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG23 | 1:A:96:ALA:HB1 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG23 | 1:A:96:ALA:HB2 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG23 | 1:A:96:ALA:HB3 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:7:LEU:HD11 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:7:LEU:HD12 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:7:LEU:HD13 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:7:LEU:HD11 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:7:LEU:HD12 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:7:LEU:HD13 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:7:LEU:HD11 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:7:LEU:HD12 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:7:LEU:HD13 | 3 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1180) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:14:LEU:HA | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1180) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:14:LEU:HA | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1180) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:14:LEU:HA | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:106:GLN:HB2 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:106:GLN:HB2 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:106:GLN:HB2 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1340) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HE1 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1340) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HE2 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1340) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HE3 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1351) | 1:A:69:MET:HE1 | 1:A:70:CYS:H | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1351) | 1:A:69:MET:HE2 | 1:A:70:CYS:H | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1351) | 1:A:69:MET:HE3 | 1:A:70:CYS:H | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,567) | 1:A:1:MET:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 2 | 1.25 | 0.42 | 1.25 |
| (1,1061) | 1:A:46:ARG:HG3 | 1:A:66:THR:HG21 | 2 | 1.18 | 0.01 | 1.18 |
| (1,1061) | 1:A:46:ARG:HG3 | 1:A:66:THR:HG22 | 2 | 1.18 | 0.01 | 1.18 |
| (1,1061) | 1:A:46:ARG:HG3 | 1:A:66:THR:HG23 | 2 | 1.18 | 0.01 | 1.18 |
| (1,930) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:22:VAL:H | 2 | 1.03 | 0.08 | 1.03 |
| (1,1280) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:101:LEU:HD21 | 2 | 0.96 | 0.02 | 0.96 |
| (1,1280) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:101:LEU:HD22 | 2 | 0.96 | 0.02 | 0.96 |
| (1,1280) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:101:LEU:HD23 | 2 | 0.96 | 0.02 | 0.96 |
| (1,570) | 1:A:1:MET:HG2 | 1:A:2:VAL:HG21 | 2 | 0.86 | 0.14 | 0.86 |
| (1,570) | 1:A:1:MET:HG2 | 1:A:2:VAL:HG22 | 2 | 0.86 | 0.14 | 0.86 |
| (1,570) | 1:A:1:MET:HG2 | 1:A:2:VAL:HG23 | 2 | 0.86 | 0.14 | 0.86 |
| (1,257) | 1:A:76:ASN:HB2 | 1:A:77:GLU:HB2 | 2 | 0.83 | 0.65 | 0.83 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:101:LEU:HD21 | 2 | 0.8 | 0.45 | 0.8 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:101:LEU:HD22 | 2 | 0.8 | 0.45 | 0.8 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:101:LEU:HD23 | 2 | 0.8 | 0.45 | 0.8 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:101:LEU:HD21 | 2 | 0.8 | 0.45 | 0.8 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:101:LEU:HD22 | 2 | 0.8 | 0.45 | 0.8 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:101:LEU:HD23 | 2 | 0.8 | 0.45 | 0.8 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:101:LEU:HD21 | 2 | 0.8 | 0.45 | 0.8 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:101:LEU:HD22 | 2 | 0.8 | 0.45 | 0.8 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:101:LEU:HD23 | 2 | 0.8 | 0.45 | 0.8 |
| (1,824) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:101:LEU:HD21 | 2 | 0.78 | 0.02 | 0.78 |
| (1,824) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:101:LEU:HD22 | 2 | 0.78 | 0.02 | 0.78 |
| (1,824) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:101:LEU:HD23 | 2 | 0.78 | 0.02 | 0.78 |
| (1,1737) | 1:A:111:LYS:HD2 | 1:A:112:LEU:H | 2 | 0.76 | 0.24 | 0.76 |
| (1,118) | 1:A:47:PHE:HB2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 2 | 0.75 | 0.36 | 0.75 |
| (1,596) | 1:A:76:ASN:H | 1:A:77:GLU:HB2 | 2 | 0.75 | 0.44 | 0.75 |
| (1,2200) | 1:A:101:LEU:HD21 | 1:A:110:TYR:HE1 | 2 | 0.64 | 0.29 | 0.64 |
| (1,2200) | 1:A:101:LEU:HD21 | 1:A:110:TYR:HE2 | 2 | 0.64 | 0.29 | 0.64 |
| (1,2200) | 1:A:101:LEU:HD22 | 1:A:110:TYR:HE1 | 2 | 0.64 | 0.29 | 0.64 |
| (1,2200) | 1:A:101:LEU:HD22 | 1:A:110:TYR:HE2 | 2 | 0.64 | 0.29 | 0.64 |
| (1,2200) | 1:A:101:LEU:HD23 | 1:A:110:TYR:HE1 | 2 | 0.64 | 0.29 | 0.64 |
| (1,2200) | 1:A:101:LEU:HD23 | 1:A:110:TYR:HE2 | 2 | 0.64 | 0.29 | 0.64 |
| (1,828) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:101:LEU:HD21 | 2 | 0.62 | 0.08 | 0.62 |
| (1,828) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:101:LEU:HD22 | 2 | 0.62 | 0.08 | 0.62 |
| (1,828) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:101:LEU:HD23 | 2 | 0.62 | 0.08 | 0.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|------------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,2068) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:106:GLN:HB3 | 2 | 0.6 | 0.19 | 0.6 |
| (1,1686) | 1:A:111:LYS:HD2 | 1:A:113:ALA:H | 2 | 0.55 | 0.08 | 0.55 |
| (1,868) | 1:A:63:LEU:HD11 | 1:A:83:SER:HB2 | 2 | 0.55 | 0.22 | 0.55 |
| (1,868) | 1:A:63:LEU:HD12 | 1:A:83:SER:HB2 | 2 | 0.55 | 0.22 | 0.55 |
| (1,868) | 1:A:63:LEU:HD13 | 1:A:83:SER:HB2 | 2 | 0.55 | 0.22 | 0.55 |
| (1,868) | 1:A:63:LEU:HD21 | 1:A:83:SER:HB2 | 2 | 0.55 | 0.22 | 0.55 |
| (1,868) | 1:A:63:LEU:HD22 | 1:A:83:SER:HB2 | 2 | 0.55 | 0.22 | 0.55 |
| (1,868) | 1:A:63:LEU:HD23 | 1:A:83:SER:HB2 | 2 | 0.55 | 0.22 | 0.55 |
| (1,425) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:17:VAL:HB | 2 | 0.48 | 0.36 | 0.48 |
| (1,425) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:17:VAL:HB | 2 | 0.48 | 0.36 | 0.48 |
| (1,425) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:17:VAL:HB | 2 | 0.48 | 0.36 | 0.48 |
| (1,1149) | 1:A:101:LEU:HD11 | 1:A:102:ALA:H | 2 | 0.44 | 0.18 | 0.44 |
| (1,1149) | 1:A:101:LEU:HD12 | 1:A:102:ALA:H | 2 | 0.44 | 0.18 | 0.44 |
| (1,1149) | 1:A:101:LEU:HD13 | 1:A:102:ALA:H | 2 | 0.44 | 0.18 | 0.44 |
| (1,877) | 1:A:12:PHE:HD1 | 1:A:99:LEU:HD11 | 2 | 0.41 | 0.19 | 0.41 |
| (1,877) | 1:A:12:PHE:HD1 | 1:A:99:LEU:HD12 | 2 | 0.41 | 0.19 | 0.41 |
| (1,877) | 1:A:12:PHE:HD1 | 1:A:99:LEU:HD13 | 2 | 0.41 | 0.19 | 0.41 |
| (1,877) | 1:A:12:PHE:HD2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 2 | 0.41 | 0.19 | 0.41 |
| (1,877) | 1:A:12:PHE:HD2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 2 | 0.41 | 0.19 | 0.41 |
| (1,877) | 1:A:12:PHE:HD2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 2 | 0.41 | 0.19 | 0.41 |
| (1,8) | 1:A:61:LYS:HG2 | 1:A:62:GLY:HA3 | 2 | 0.4 | 0.08 | 0.4 |
| (1,8) | 1:A:61:LYS:HG3 | 1:A:62:GLY:HA3 | 2 | 0.4 | 0.08 | 0.4 |
| (1,697) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HG2 | 2 | 0.38 | 0.01 | 0.38 |
| (1,827) | 1:A:101:LEU:HA | 1:A:101:LEU:HD21 | 2 | 0.38 | 0.01 | 0.38 |
| (1,827) | 1:A:101:LEU:HA | 1:A:101:LEU:HD22 | 2 | 0.38 | 0.01 | 0.38 |
| (1,827) | 1:A:101:LEU:HA | 1:A:101:LEU:HD23 | 2 | 0.38 | 0.01 | 0.38 |
| (1,1101) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:108:LEU:HA | 2 | 0.34 | 0.2 | 0.34 |
| (1,1101) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:108:LEU:HA | 2 | 0.34 | 0.2 | 0.34 |
| (1,1101) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:108:LEU:HA | 2 | 0.34 | 0.2 | 0.34 |
| (1,695) | 1:A:42:SER:HA | 1:A:46:ARG:HG2 | 2 | 0.29 | 0.02 | 0.29 |
| (1,691) | 1:A:42:SER:HB2 | 1:A:46:ARG:HG2 | 2 | 0.28 | 0.08 | 0.28 |
| (1,1040) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:94:LEU:H | 2 | 0.28 | 0.08 | 0.28 |
| (1,1040) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:94:LEU:H | 2 | 0.28 | 0.08 | 0.28 |
| (1,1040) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:94:LEU:H | 2 | 0.28 | 0.08 | 0.28 |
| (1,2018) | 1:A:74:GLN:HB2 | 1:A:75:LEU:H | 2 | 0.26 | 0.07 | 0.26 |
| (1,202) | 1:A:76:ASN:HA | 1:A:79:ASP:HB2 | 2 | 0.24 | 0.14 | 0.24 |
| (1,469) | 1:A:25:ASP:HB2 | 1:A:26:LYS:HB2 | 2 | 0.24 | 0.13 | 0.24 |
| (1,469) | 1:A:25:ASP:HB3 | 1:A:26:LYS:HB2 | 2 | 0.24 | 0.13 | 0.24 |
| (1,49) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:99:LEU:HD21 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,49) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:99:LEU:HD22 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,49) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:99:LEU:HD23 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,572) | 1:A:6:GLN:HB3 | 1:A:7:LEU:H | 2 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|------------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,330) | 1:A:87:LYS:H | 1:A:88:GLU:HG3 | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,538) | 1:A:47:PHE:HA | 1:A:65:MET:HG3 | 2 | 0.16 | 0.0 | 0.16 |
| (1,978) | 1:A:12:PHE:HZ | 1:A:112:LEU:HD21 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,978) | 1:A:12:PHE:HZ | 1:A:112:LEU:HD22 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,978) | 1:A:12:PHE:HZ | 1:A:112:LEU:HD23 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,2024) | 1:A:70:CYS:HB2 | 1:A:72:ASN:H | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1656) | 1:A:20:LYS:HB2 | 1:A:21:PRO:HD2 | 2 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,252) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HB2 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,2044) | 1:A:7:LEU:H | 1:A:8:GLN:HB2 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1623) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HA | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1623) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HA | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1623) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HA | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1623) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HA | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1623) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HA | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1623) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HA | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1137) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:15:GLU:HA | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1137) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:15:GLU:HA | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1137) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:15:GLU:HA | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,565) | 1:A:1:MET:HG3 | 1:A:3:THR:HG21 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,565) | 1:A:1:MET:HG3 | 1:A:3:THR:HG22 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,565) | 1:A:1:MET:HG3 | 1:A:3:THR:HG23 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1296) | 1:A:104:ALA:HB1 | 1:A:105:LYS:HE2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1296) | 1:A:104:ALA:HB1 | 1:A:105:LYS:HE3 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1296) | 1:A:104:ALA:HB2 | 1:A:105:LYS:HE2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1296) | 1:A:104:ALA:HB2 | 1:A:105:LYS:HE3 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1296) | 1:A:104:ALA:HB3 | 1:A:105:LYS:HE2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1296) | 1:A:104:ALA:HB3 | 1:A:105:LYS:HE3 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1373) | 1:A:38:MET:H | 1:A:38:MET:HE1 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1373) | 1:A:38:MET:H | 1:A:38:MET:HE2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1373) | 1:A:38:MET:H | 1:A:38:MET:HE3 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,142) | 1:A:34:GLY:HA3 | 1:A:35:GLU:HG2 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,142) | 1:A:34:GLY:HA3 | 1:A:35:GLU:HG3 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,344) | 1:A:35:GLU:HG2 | 1:A:36:LYS:HG2 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,344) | 1:A:35:GLU:HG2 | 1:A:36:LYS:HG3 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,344) | 1:A:35:GLU:HG3 | 1:A:36:LYS:HG2 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,344) | 1:A:35:GLU:HG3 | 1:A:36:LYS:HG3 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1068) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:5:GLU:HB2 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1068) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:5:GLU:HB2 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1068) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:5:GLU:HB2 | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1559) | 1:A:63:LEU:HD11 | 1:A:65:MET:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1559) | 1:A:63:LEU:HD12 | 1:A:65:MET:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1559) | 1:A:63:LEU:HD13 | 1:A:65:MET:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

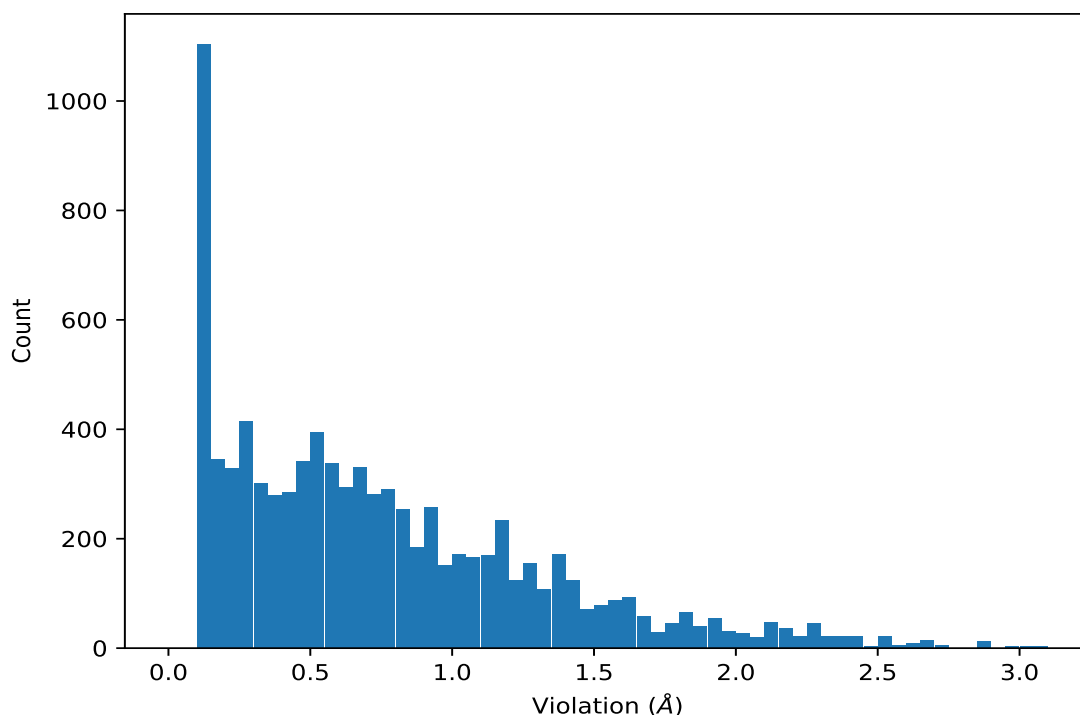
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|---------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1559) | 1:A:63:LEU:HD21 | 1:A:65:MET:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1559) | 1:A:63:LEU:HD22 | 1:A:65:MET:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,1559) | 1:A:63:LEU:HD23 | 1:A:65:MET:HA | 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) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 6 | 3.06 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 6 | 3.06 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 6 | 3.06 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 1 | 3.02 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 1 | 3.02 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 1 | 3.02 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 5 | 2.99 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 5 | 2.99 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 5 | 2.99 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 2 | 2.9 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 2 | 2.9 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 2 | 2.9 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 3 | 2.88 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 3 | 2.88 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 3 | 2.88 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 11 | 2.88 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 11 | 2.88 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 11 | 2.88 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 17 | 2.86 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 17 | 2.86 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 17 | 2.86 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 6 | 2.73 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 6 | 2.73 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 6 | 2.73 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 10 | 2.7 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 10 | 2.7 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 10 | 2.7 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 16 | 2.69 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 16 | 2.69 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 16 | 2.69 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 18 | 2.69 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 18 | 2.69 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 18 | 2.69 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 14 | 2.68 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 14 | 2.68 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 14 | 2.68 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 3 | 2.67 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 3 | 2.67 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 3 | 2.67 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 14 | 2.67 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 14 | 2.67 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 14 | 2.67 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 17 | 2.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 17 | 2.65 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 17 | 2.65 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 17 | 2.63 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 17 | 2.63 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 17 | 2.63 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 18 | 2.63 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 18 | 2.63 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 18 | 2.63 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 3 | 2.57 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 3 | 2.57 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 3 | 2.57 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 11 | 2.56 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 11 | 2.56 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 11 | 2.56 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 9 | 2.55 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 9 | 2.55 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 9 | 2.55 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 2 | 2.54 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 2 | 2.54 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 2 | 2.54 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 6 | 2.53 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 6 | 2.53 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 6 | 2.53 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 6 | 2.51 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 6 | 2.51 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 6 | 2.51 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 12 | 2.5 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 12 | 2.5 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 12 | 2.5 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 19 | 2.5 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 19 | 2.5 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 19 | 2.5 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 7 | 2.5 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 7 | 2.5 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 7 | 2.5 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 4 | 2.47 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 4 | 2.47 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 4 | 2.47 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD21 | 19 | 2.43 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD22 | 19 | 2.43 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD23 | 19 | 2.43 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD21 | 19 | 2.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD22 | 19 | 2.43 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD23 | 19 | 2.43 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD21 | 19 | 2.43 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD22 | 19 | 2.43 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD23 | 19 | 2.43 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 13 | 2.43 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 13 | 2.43 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 13 | 2.43 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 15 | 2.42 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 15 | 2.42 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 15 | 2.42 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 15 | 2.41 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 15 | 2.41 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 15 | 2.41 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 9 | 2.41 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 9 | 2.41 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 9 | 2.41 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 9 | 2.4 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 9 | 2.4 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 9 | 2.4 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 1 | 2.4 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 1 | 2.4 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 1 | 2.4 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 13 | 2.39 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 13 | 2.39 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 13 | 2.39 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 16 | 2.39 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 16 | 2.39 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 16 | 2.39 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 11 | 2.38 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 11 | 2.38 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 11 | 2.38 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 19 | 2.38 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 19 | 2.38 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 19 | 2.38 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 9 | 2.37 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 9 | 2.37 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 9 | 2.37 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD21 | 5 | 2.34 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD22 | 5 | 2.34 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD23 | 5 | 2.34 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD21 | 5 | 2.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD22 | 5 | 2.34 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD23 | 5 | 2.34 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD21 | 5 | 2.34 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD22 | 5 | 2.34 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD23 | 5 | 2.34 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 1 | 2.33 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 1 | 2.33 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 1 | 2.33 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 5 | 2.33 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 5 | 2.33 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 5 | 2.33 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 7 | 2.31 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 7 | 2.31 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 7 | 2.31 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD21 | 11 | 2.31 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD22 | 11 | 2.31 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD23 | 11 | 2.31 |
| (1,448) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 16 | 2.31 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE2 | 9 | 2.3 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE3 | 9 | 2.3 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE2 | 9 | 2.3 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE3 | 9 | 2.3 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE2 | 9 | 2.3 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE3 | 9 | 2.3 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 5 | 2.29 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 5 | 2.29 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 5 | 2.29 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 7 | 2.29 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 7 | 2.29 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 7 | 2.29 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE2 | 7 | 2.29 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE3 | 7 | 2.29 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE2 | 7 | 2.29 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE3 | 7 | 2.29 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE2 | 7 | 2.29 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE3 | 7 | 2.29 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:HB2 | 1 | 2.28 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:HB2 | 1 | 2.28 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:HB2 | 1 | 2.28 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 7 | 2.27 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 7 | 2.27 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 7 | 2.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE2 | 11 | 2.27 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE3 | 11 | 2.27 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE2 | 11 | 2.27 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE3 | 11 | 2.27 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE2 | 11 | 2.27 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE3 | 11 | 2.27 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HD3 | 11 | 2.27 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HD3 | 11 | 2.27 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HD3 | 11 | 2.27 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD21 | 13 | 2.26 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD22 | 13 | 2.26 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD23 | 13 | 2.26 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD21 | 13 | 2.26 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD22 | 13 | 2.26 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD23 | 13 | 2.26 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD21 | 13 | 2.26 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD22 | 13 | 2.26 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD23 | 13 | 2.26 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 11 | 2.26 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 11 | 2.26 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 11 | 2.26 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD21 | 10 | 2.24 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD22 | 10 | 2.24 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD23 | 10 | 2.24 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD21 | 10 | 2.24 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD22 | 10 | 2.24 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD23 | 10 | 2.24 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD21 | 10 | 2.24 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD22 | 10 | 2.24 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD23 | 10 | 2.24 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 12 | 2.23 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 12 | 2.23 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 12 | 2.23 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 2 | 2.23 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 2 | 2.23 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 2 | 2.23 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 3 | 2.21 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 3 | 2.21 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 3 | 2.21 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 18 | 2.2 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 18 | 2.2 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 18 | 2.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD21 | 15 | 2.18 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD22 | 15 | 2.18 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD23 | 15 | 2.18 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD21 | 15 | 2.18 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD22 | 15 | 2.18 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD23 | 15 | 2.18 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD21 | 15 | 2.18 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD22 | 15 | 2.18 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD23 | 15 | 2.18 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 14 | 2.18 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 14 | 2.18 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 14 | 2.18 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 19 | 2.18 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 19 | 2.18 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 19 | 2.18 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:HB2 | 13 | 2.17 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:HB2 | 13 | 2.17 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:HB2 | 13 | 2.17 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD21 | 17 | 2.16 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD22 | 17 | 2.16 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD23 | 17 | 2.16 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD21 | 17 | 2.16 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD22 | 17 | 2.16 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD23 | 17 | 2.16 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD21 | 17 | 2.16 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD22 | 17 | 2.16 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD23 | 17 | 2.16 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HD3 | 17 | 2.16 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HD3 | 17 | 2.16 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HD3 | 17 | 2.16 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 4 | 2.15 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 4 | 2.15 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 4 | 2.15 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 10 | 2.15 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 10 | 2.15 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 10 | 2.15 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 5 | 2.14 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 5 | 2.14 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 5 | 2.14 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD21 | 9 | 2.14 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD22 | 9 | 2.14 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD23 | 9 | 2.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD21 | 9 | 2.14 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD22 | 9 | 2.14 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD23 | 9 | 2.14 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD21 | 9 | 2.14 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD22 | 9 | 2.14 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD23 | 9 | 2.14 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 8 | 2.14 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 8 | 2.14 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 8 | 2.14 |
| (1,448) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 9 | 2.14 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HD3 | 10 | 2.14 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HD3 | 10 | 2.14 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HD3 | 10 | 2.14 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 10 | 2.13 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 10 | 2.13 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 10 | 2.13 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:HB2 | 12 | 2.12 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:HB2 | 12 | 2.12 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:HB2 | 12 | 2.12 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 19 | 2.11 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 19 | 2.11 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 19 | 2.11 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 2.11 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 2.11 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 2.11 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 5 | 2.11 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 5 | 2.11 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 5 | 2.11 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 6 | 2.11 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 6 | 2.11 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 6 | 2.11 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:HB2 | 7 | 2.1 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:HB2 | 7 | 2.1 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:HB2 | 7 | 2.1 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:HB2 | 8 | 2.1 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:HB2 | 8 | 2.1 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:HB2 | 8 | 2.1 |
| (1,448) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 13 | 2.1 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HD3 | 2 | 2.1 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HD3 | 2 | 2.1 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HD3 | 2 | 2.1 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 19 | 2.09 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 19 | 2.09 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 19 | 2.09 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:HB2 | 4 | 2.08 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:HB2 | 4 | 2.08 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:HB2 | 4 | 2.08 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 16 | 2.08 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 16 | 2.08 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 16 | 2.08 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 9 | 2.07 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 9 | 2.07 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 9 | 2.07 |
| (1,448) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 1 | 2.07 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD21 | 10 | 2.06 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD22 | 10 | 2.06 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD23 | 10 | 2.06 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 17 | 2.06 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 17 | 2.06 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 17 | 2.06 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 4 | 2.05 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 4 | 2.05 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 4 | 2.05 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 3 | 2.04 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 3 | 2.04 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 3 | 2.04 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HA | 16 | 2.03 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HA | 16 | 2.03 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HA | 16 | 2.03 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 9 | 2.02 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 9 | 2.02 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 9 | 2.02 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 18 | 2.01 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 18 | 2.01 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 18 | 2.01 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 14 | 2.01 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 14 | 2.01 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 14 | 2.01 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD21 | 15 | 2.0 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD22 | 15 | 2.0 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD23 | 15 | 2.0 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 4 | 2.0 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 4 | 2.0 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 4 | 2.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 13 | 2.0 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 13 | 2.0 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 13 | 2.0 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE2 | 1 | 1.99 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE3 | 1 | 1.99 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE2 | 1 | 1.99 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE3 | 1 | 1.99 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE2 | 1 | 1.99 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE3 | 1 | 1.99 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 18 | 1.98 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 18 | 1.98 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 18 | 1.98 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 12 | 1.98 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 12 | 1.98 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 12 | 1.98 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 17 | 1.98 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 17 | 1.98 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 17 | 1.98 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 11 | 1.97 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 11 | 1.97 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 11 | 1.97 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 1.97 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 1.97 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 1.97 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 7 | 1.97 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 7 | 1.97 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 7 | 1.97 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 2 | 1.96 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 2 | 1.96 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 2 | 1.96 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 16 | 1.96 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 16 | 1.96 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 16 | 1.96 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 1 | 1.95 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 1 | 1.95 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 1 | 1.95 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 12 | 1.95 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 12 | 1.95 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 12 | 1.95 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 13 | 1.95 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 13 | 1.95 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 13 | 1.95 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 2 | 1.95 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 2 | 1.95 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 2 | 1.95 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE2 | 16 | 1.95 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE3 | 16 | 1.95 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE2 | 16 | 1.95 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE3 | 16 | 1.95 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE2 | 16 | 1.95 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE3 | 16 | 1.95 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 19 | 1.94 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 19 | 1.94 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 19 | 1.94 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 1.94 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 1.94 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 1.94 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 14 | 1.93 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 14 | 1.93 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 14 | 1.93 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD21 | 12 | 1.93 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD22 | 12 | 1.93 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD23 | 12 | 1.93 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 7 | 1.93 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 7 | 1.93 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 7 | 1.93 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE2 | 10 | 1.93 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE3 | 10 | 1.93 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE2 | 10 | 1.93 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE3 | 10 | 1.93 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE2 | 10 | 1.93 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE3 | 10 | 1.93 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 8 | 1.92 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 8 | 1.92 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 8 | 1.92 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 16 | 1.92 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 16 | 1.92 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 16 | 1.92 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB3 | 2 | 1.92 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB3 | 2 | 1.92 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB3 | 2 | 1.92 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE2 | 5 | 1.91 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE3 | 5 | 1.91 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE2 | 5 | 1.91 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE3 | 5 | 1.91 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE2 | 5 | 1.91 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE3 | 5 | 1.91 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:110:TYR:HB2 | 2 | 1.9 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:110:TYR:HB2 | 2 | 1.9 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:110:TYR:HB2 | 2 | 1.9 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 16 | 1.89 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 16 | 1.89 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 16 | 1.89 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 7 | 1.88 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 7 | 1.88 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 7 | 1.88 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 14 | 1.88 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 14 | 1.88 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 14 | 1.88 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 7 | 1.88 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 7 | 1.88 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 7 | 1.88 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 12 | 1.88 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 12 | 1.88 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 12 | 1.88 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB3 | 17 | 1.88 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB3 | 17 | 1.88 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB3 | 17 | 1.88 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 9 | 1.87 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 9 | 1.87 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 9 | 1.87 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 1 | 1.86 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 1 | 1.86 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 1 | 1.86 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD21 | 14 | 1.86 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD22 | 14 | 1.86 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD23 | 14 | 1.86 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 19 | 1.86 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 19 | 1.86 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 19 | 1.86 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 17 | 1.85 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 17 | 1.85 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 17 | 1.85 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 12 | 1.85 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 12 | 1.85 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 12 | 1.85 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:HB2 | 9 | 1.84 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:HB2 | 9 | 1.84 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:HB2 | 9 | 1.84 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 6 | 1.84 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 6 | 1.84 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 6 | 1.84 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 11 | 1.84 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 11 | 1.84 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 11 | 1.84 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 18 | 1.84 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 18 | 1.84 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 18 | 1.84 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 14 | 1.84 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 14 | 1.84 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 14 | 1.84 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 18 | 1.84 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 18 | 1.84 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 18 | 1.84 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:100:THR:H | 2 | 1.84 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:100:THR:H | 2 | 1.84 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:100:THR:H | 2 | 1.84 |
| (1,310) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:111:LYS:HG3 | 17 | 1.83 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG3 | 7 | 1.82 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG3 | 7 | 1.82 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG3 | 7 | 1.82 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG3 | 11 | 1.82 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG3 | 11 | 1.82 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG3 | 11 | 1.82 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:110:TYR:HB2 | 10 | 1.82 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:110:TYR:HB2 | 10 | 1.82 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:110:TYR:HB2 | 10 | 1.82 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 1 | 1.81 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 1 | 1.81 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 1 | 1.81 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB3 | 11 | 1.81 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB3 | 11 | 1.81 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB3 | 11 | 1.81 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 17 | 1.81 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 17 | 1.81 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 17 | 1.81 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:HB2 | 19 | 1.8 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:HB2 | 19 | 1.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:HB2 | 19 | 1.8 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD21 | 14 | 1.8 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD22 | 14 | 1.8 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD23 | 14 | 1.8 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 5 | 1.8 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 5 | 1.8 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 5 | 1.8 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 11 | 1.8 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 11 | 1.8 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 11 | 1.8 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 10 | 1.8 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 10 | 1.8 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 10 | 1.8 |
| (1,2091) | 1:A:91:GLN:HE22 | 1:A:103:THR:HA | 9 | 1.8 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:110:TYR:HB2 | 11 | 1.8 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:110:TYR:HB2 | 11 | 1.8 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:110:TYR:HB2 | 11 | 1.8 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HA | 7 | 1.8 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HA | 7 | 1.8 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HA | 7 | 1.8 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:100:THR:H | 4 | 1.8 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:100:THR:H | 4 | 1.8 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:100:THR:H | 4 | 1.8 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD21 | 17 | 1.79 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD22 | 17 | 1.79 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD23 | 17 | 1.79 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 3 | 1.79 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 3 | 1.79 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 3 | 1.79 |
| (1,2091) | 1:A:91:GLN:HE22 | 1:A:103:THR:HA | 10 | 1.79 |
| (1,1937) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:H | 3 | 1.79 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 4 | 1.78 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 4 | 1.78 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 4 | 1.78 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:HB2 | 18 | 1.78 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:HB2 | 18 | 1.78 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:HB2 | 18 | 1.78 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 15 | 1.77 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 15 | 1.77 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 15 | 1.77 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG3 | 9 | 1.77 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG3 | 9 | 1.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG3 | 9 | 1.77 |
| (1,310) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:111:LYS:HG3 | 19 | 1.77 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 12 | 1.76 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 12 | 1.76 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 12 | 1.76 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 8 | 1.76 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 8 | 1.76 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 8 | 1.76 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 6 | 1.76 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 6 | 1.76 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 6 | 1.76 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 13 | 1.76 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 13 | 1.76 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 13 | 1.76 |
| (1,516) | 1:A:57:GLU:HB2 | 1:A:91:GLN:HE22 | 11 | 1.76 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD11 | 15 | 1.76 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD12 | 15 | 1.76 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD13 | 15 | 1.76 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 2 | 1.75 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 2 | 1.75 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 2 | 1.75 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:H | 11 | 1.75 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:H | 11 | 1.75 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:H | 11 | 1.75 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 9 | 1.75 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 18 | 1.75 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD21 | 7 | 1.74 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD22 | 7 | 1.74 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD23 | 7 | 1.74 |
| (1,448) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 18 | 1.74 |
| (1,448) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 19 | 1.74 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD11 | 8 | 1.74 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD12 | 8 | 1.74 |
| (1,2096) | 1:A:97:ASN:HD22 | 1:A:112:LEU:HD13 | 8 | 1.74 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 10 | 1.73 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 10 | 1.73 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 10 | 1.73 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 1 | 1.73 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 1 | 1.73 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 1 | 1.73 |
| (1,1937) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:H | 14 | 1.73 |
| (1,1710) | 1:A:39:ILE:H | 1:A:48:SER:HB2 | 8 | 1.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,117) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 5 | 1.73 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HD3 | 1 | 1.73 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HD3 | 1 | 1.73 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HD3 | 1 | 1.73 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD21 | 12 | 1.72 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD22 | 12 | 1.72 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD23 | 12 | 1.72 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG3 | 2 | 1.71 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG3 | 2 | 1.71 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG3 | 2 | 1.71 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 4 | 1.71 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 4 | 1.71 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 4 | 1.71 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 5 | 1.7 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 5 | 1.7 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 5 | 1.7 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 13 | 1.7 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 13 | 1.7 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 13 | 1.7 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 16 | 1.7 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 16 | 1.7 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 16 | 1.7 |
| (1,516) | 1:A:57:GLU:HB2 | 1:A:91:GLN:HE22 | 19 | 1.7 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG11 | 15 | 1.7 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG12 | 15 | 1.7 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG13 | 15 | 1.7 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:100:THR:H | 5 | 1.7 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:100:THR:H | 5 | 1.7 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:100:THR:H | 5 | 1.7 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:100:THR:H | 8 | 1.7 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:100:THR:H | 8 | 1.7 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:100:THR:H | 8 | 1.7 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 6 | 1.69 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 6 | 1.69 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 6 | 1.69 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 7 | 1.69 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 7 | 1.69 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 7 | 1.69 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB3 | 5 | 1.69 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB3 | 5 | 1.69 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB3 | 5 | 1.69 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD11 | 6 | 1.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD12 | 6 | 1.69 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD13 | 6 | 1.69 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 3 | 1.68 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 3 | 1.68 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 3 | 1.68 |
| (1,310) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:111:LYS:HG3 | 18 | 1.68 |
| (1,1937) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:H | 7 | 1.68 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HA | 17 | 1.68 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HA | 17 | 1.68 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HA | 17 | 1.68 |
| (1,567) | 1:A:1:MET:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 17 | 1.67 |
| (1,448) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 7 | 1.67 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE2 | 17 | 1.67 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE3 | 17 | 1.67 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE2 | 17 | 1.67 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE3 | 17 | 1.67 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE2 | 17 | 1.67 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE3 | 17 | 1.67 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD11 | 11 | 1.66 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD12 | 11 | 1.66 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD13 | 11 | 1.66 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD11 | 11 | 1.66 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD12 | 11 | 1.66 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD13 | 11 | 1.66 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD11 | 11 | 1.66 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD12 | 11 | 1.66 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD13 | 11 | 1.66 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:H | 6 | 1.66 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:H | 6 | 1.66 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:H | 6 | 1.66 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 15 | 1.65 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 15 | 1.65 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 15 | 1.65 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 5 | 1.64 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 5 | 1.64 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 5 | 1.64 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD11 | 11 | 1.64 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD12 | 11 | 1.64 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD13 | 11 | 1.64 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD21 | 5 | 1.64 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD22 | 5 | 1.64 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD23 | 5 | 1.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 6 | 1.64 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 6 | 1.64 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 6 | 1.64 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG3 | 1 | 1.64 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG3 | 1 | 1.64 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG3 | 1 | 1.64 |
| (1,1699) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:H | 13 | 1.64 |
| (1,1699) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:H | 13 | 1.64 |
| (1,1699) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:H | 13 | 1.64 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD11 | 3 | 1.64 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD12 | 3 | 1.64 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD13 | 3 | 1.64 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 1 | 1.63 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 1 | 1.63 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 1 | 1.63 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 10 | 1.63 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 10 | 1.63 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 10 | 1.63 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD11 | 17 | 1.63 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD12 | 17 | 1.63 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD13 | 17 | 1.63 |
| (1,2104) | 1:A:37:MET:H | 1:A:38:MET:HB2 | 7 | 1.63 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 15 | 1.62 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 15 | 1.62 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 15 | 1.62 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 13 | 1.62 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 13 | 1.62 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 13 | 1.62 |
| (1,516) | 1:A:57:GLU:HB2 | 1:A:91:GLN:HE22 | 15 | 1.62 |
| (1,432) | 1:A:92:VAL:HB | 1:A:99:LEU:HD21 | 7 | 1.62 |
| (1,432) | 1:A:92:VAL:HB | 1:A:99:LEU:HD22 | 7 | 1.62 |
| (1,432) | 1:A:92:VAL:HB | 1:A:99:LEU:HD23 | 7 | 1.62 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 8 | 1.62 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 8 | 1.62 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 8 | 1.62 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HA | 10 | 1.62 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HA | 10 | 1.62 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HA | 10 | 1.62 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 9 | 1.61 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 9 | 1.61 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 9 | 1.61 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 15 | 1.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 15 | 1.61 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 15 | 1.61 |
| (1,617) | 1:A:31:ILE:HG12 | 1:A:41:GLY:HA2 | 10 | 1.61 |
| (1,2140) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:106:GLN:HE22 | 9 | 1.61 |
| (1,1659) | 1:A:20:LYS:HB2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 16 | 1.61 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD11 | 4 | 1.61 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD12 | 4 | 1.61 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD13 | 4 | 1.61 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD11 | 4 | 1.61 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD12 | 4 | 1.61 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD13 | 4 | 1.61 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD11 | 4 | 1.61 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD12 | 4 | 1.61 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD13 | 4 | 1.61 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:100:THR:H | 6 | 1.6 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:100:THR:H | 6 | 1.6 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:100:THR:H | 6 | 1.6 |
| (1,553) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:38:MET:HB2 | 7 | 1.6 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG2 | 10 | 1.6 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG2 | 10 | 1.6 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG2 | 10 | 1.6 |
| (1,310) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:111:LYS:HG3 | 6 | 1.6 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 14 | 1.6 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD11 | 15 | 1.6 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD12 | 15 | 1.6 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD13 | 15 | 1.6 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD11 | 15 | 1.6 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD12 | 15 | 1.6 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD13 | 15 | 1.6 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD11 | 15 | 1.6 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD12 | 15 | 1.6 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD13 | 15 | 1.6 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:110:TYR:HB2 | 9 | 1.6 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:110:TYR:HB2 | 9 | 1.6 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:110:TYR:HB2 | 9 | 1.6 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HA | 11 | 1.6 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HA | 11 | 1.6 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HA | 11 | 1.6 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 11 | 1.59 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 11 | 1.59 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 11 | 1.59 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 13 | 1.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 13 | 1.59 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 13 | 1.59 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 9 | 1.59 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 9 | 1.59 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 9 | 1.59 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD21 | 14 | 1.59 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD22 | 14 | 1.59 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD23 | 14 | 1.59 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 9 | 1.59 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 9 | 1.59 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 9 | 1.59 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD11 | 11 | 1.59 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD12 | 11 | 1.59 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD13 | 11 | 1.59 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 15 | 1.59 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 19 | 1.59 |
| (1,1802) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:H | 19 | 1.59 |
| (1,1659) | 1:A:20:LYS:HB2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 13 | 1.59 |
| (1,1116) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 12 | 1.59 |
| (1,1116) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 12 | 1.59 |
| (1,1116) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 12 | 1.59 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:81:THR:H | 7 | 1.58 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:81:THR:H | 7 | 1.58 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:81:THR:H | 7 | 1.58 |
| (1,686) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:29:PRO:HB3 | 3 | 1.58 |
| (1,686) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:29:PRO:HB3 | 3 | 1.58 |
| (1,686) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:29:PRO:HB3 | 3 | 1.58 |
| (1,448) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 2 | 1.58 |
| (1,448) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 4 | 1.58 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 16 | 1.58 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 16 | 1.58 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 16 | 1.58 |
| (1,2091) | 1:A:91:GLN:HE22 | 1:A:103:THR:HA | 17 | 1.58 |
| (1,1802) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:H | 7 | 1.58 |
| (1,1659) | 1:A:20:LYS:HB2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 7 | 1.58 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HD3 | 16 | 1.58 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HD3 | 16 | 1.58 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HD3 | 16 | 1.58 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 17 | 1.57 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 17 | 1.57 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 17 | 1.57 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 2 | 1.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 2 | 1.57 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 2 | 1.57 |
| (1,651) | 1:A:95:THR:HB | 1:A:98:GLN:HB2 | 2 | 1.57 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG3 | 10 | 1.57 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG3 | 10 | 1.57 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG3 | 10 | 1.57 |
| (1,2091) | 1:A:91:GLN:HE22 | 1:A:103:THR:HA | 12 | 1.57 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG11 | 4 | 1.57 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG12 | 4 | 1.57 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG13 | 4 | 1.57 |
| (1,1659) | 1:A:20:LYS:HB2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 3 | 1.57 |
| (1,1659) | 1:A:20:LYS:HB2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 6 | 1.57 |
| (1,1277) | 1:A:13:VAL:HA | 1:A:110:TYR:HB2 | 2 | 1.57 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 7 | 1.56 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 7 | 1.56 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 7 | 1.56 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:81:THR:H | 11 | 1.56 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:81:THR:H | 11 | 1.56 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:81:THR:H | 11 | 1.56 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 11 | 1.56 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 11 | 1.56 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 11 | 1.56 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD21 | 11 | 1.56 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD22 | 11 | 1.56 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD23 | 11 | 1.56 |
| (1,448) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 15 | 1.56 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 15 | 1.56 |
| (1,1802) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:H | 12 | 1.56 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 19 | 1.55 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 19 | 1.55 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 19 | 1.55 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 1 | 1.55 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 1 | 1.55 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 1 | 1.55 |
| (1,448) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 6 | 1.55 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 19 | 1.55 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 19 | 1.55 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 19 | 1.55 |
| (1,1659) | 1:A:20:LYS:HB2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 1 | 1.55 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:110:TYR:HB2 | 16 | 1.55 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:110:TYR:HB2 | 16 | 1.55 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:110:TYR:HB2 | 16 | 1.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 10 | 1.54 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 10 | 1.54 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 10 | 1.54 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD21 | 8 | 1.54 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD22 | 8 | 1.54 |
| (1,976) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:112:LEU:HD23 | 8 | 1.54 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 12 | 1.54 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 12 | 1.54 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 12 | 1.54 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG2 | 9 | 1.54 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG2 | 9 | 1.54 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG2 | 9 | 1.54 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 12 | 1.54 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 12 | 1.54 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 12 | 1.54 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 17 | 1.54 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 17 | 1.54 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 17 | 1.54 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 16 | 1.54 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD21 | 9 | 1.53 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD22 | 9 | 1.53 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD23 | 9 | 1.53 |
| (1,448) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 17 | 1.53 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD11 | 4 | 1.53 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD12 | 4 | 1.53 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD13 | 4 | 1.53 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD11 | 16 | 1.53 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD12 | 16 | 1.53 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD13 | 16 | 1.53 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 15 | 1.53 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 15 | 1.53 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 15 | 1.53 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD11 | 2 | 1.53 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD12 | 2 | 1.53 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD13 | 2 | 1.53 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HD3 | 5 | 1.53 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HD3 | 5 | 1.53 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HD3 | 5 | 1.53 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 9 | 1.52 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 9 | 1.52 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 9 | 1.52 |
| (1,1937) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:H | 17 | 1.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1843) | 1:A:23:THR:H | 1:A:74:GLN:HE21 | 13 | 1.52 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 9 | 1.52 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 9 | 1.52 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 9 | 1.52 |
| (1,1659) | 1:A:20:LYS:HB2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 2 | 1.52 |
| (1,1277) | 1:A:13:VAL:HA | 1:A:110:TYR:HB2 | 11 | 1.52 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD21 | 15 | 1.51 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD22 | 15 | 1.51 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD23 | 15 | 1.51 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD21 | 8 | 1.51 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD22 | 8 | 1.51 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD23 | 8 | 1.51 |
| (1,2016) | 1:A:106:GLN:HE22 | 1:A:107:THR:H | 8 | 1.51 |
| (1,1843) | 1:A:23:THR:H | 1:A:74:GLN:HE21 | 8 | 1.51 |
| (1,1802) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:H | 13 | 1.51 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 11 | 1.51 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 11 | 1.51 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 11 | 1.51 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HA | 9 | 1.51 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HA | 9 | 1.51 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HA | 9 | 1.51 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD21 | 7 | 1.5 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD22 | 7 | 1.5 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD23 | 7 | 1.5 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 6 | 1.5 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB2 | 1:A:75:LEU:HB3 | 1 | 1.5 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB3 | 1:A:75:LEU:HB3 | 1 | 1.5 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 8 | 1.5 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 8 | 1.5 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 8 | 1.5 |
| (1,1843) | 1:A:23:THR:H | 1:A:74:GLN:HE21 | 2 | 1.5 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE1 | 13 | 1.5 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE2 | 13 | 1.5 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE3 | 13 | 1.5 |
| (1,1659) | 1:A:20:LYS:HB2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 15 | 1.5 |
| (1,1277) | 1:A:13:VAL:HA | 1:A:110:TYR:HB2 | 14 | 1.5 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD21 | 13 | 1.49 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD22 | 13 | 1.49 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD23 | 13 | 1.49 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 2 | 1.49 |
| (1,1937) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:H | 8 | 1.49 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 1.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 1.49 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 1.49 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 19 | 1.48 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 19 | 1.48 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 19 | 1.48 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 15 | 1.48 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD12 | 15 | 1.48 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD13 | 15 | 1.48 |
| (1,448) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 12 | 1.48 |
| (1,257) | 1:A:76:ASN:HB2 | 1:A:77:GLU:HB2 | 19 | 1.48 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 13 | 1.48 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 6 | 1.48 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG11 | 9 | 1.48 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG12 | 9 | 1.48 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG13 | 9 | 1.48 |
| (1,1659) | 1:A:20:LYS:HB2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 18 | 1.48 |
| (1,1174) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HG3 | 7 | 1.48 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:H | 12 | 1.47 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:H | 12 | 1.47 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:H | 12 | 1.47 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 18 | 1.47 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 18 | 1.47 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 18 | 1.47 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 19 | 1.47 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 19 | 1.47 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 19 | 1.47 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 11 | 1.47 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 11 | 1.47 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 11 | 1.47 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 7 | 1.47 |
| (1,1843) | 1:A:23:THR:H | 1:A:74:GLN:HE21 | 1 | 1.47 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE1 | 9 | 1.47 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE2 | 9 | 1.47 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE3 | 9 | 1.47 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD11 | 12 | 1.47 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD12 | 12 | 1.47 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD13 | 12 | 1.47 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD11 | 12 | 1.47 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD12 | 12 | 1.47 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD13 | 12 | 1.47 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD11 | 12 | 1.47 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD12 | 12 | 1.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD13 | 12 | 1.47 |
| (1,117) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 4 | 1.47 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HD3 | 7 | 1.47 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HD3 | 7 | 1.47 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HD3 | 7 | 1.47 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 10 | 1.46 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 10 | 1.46 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 10 | 1.46 |
| (1,651) | 1:A:95:THR:HB | 1:A:98:GLN:HB2 | 1 | 1.46 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB2 | 2 | 1.46 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB2 | 2 | 1.46 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB2 | 2 | 1.46 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG2 | 5 | 1.46 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG2 | 5 | 1.46 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG2 | 5 | 1.46 |
| (1,2093) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:74:GLN:HB2 | 18 | 1.46 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE1 | 7 | 1.46 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE2 | 7 | 1.46 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE3 | 7 | 1.46 |
| (1,1659) | 1:A:20:LYS:HB2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 17 | 1.46 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HD3 | 9 | 1.46 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HD3 | 9 | 1.46 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HD3 | 9 | 1.46 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:100:THR:H | 19 | 1.45 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:100:THR:H | 19 | 1.45 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:100:THR:H | 19 | 1.45 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD21 | 1:A:100:THR:H | 12 | 1.45 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD22 | 1:A:100:THR:H | 12 | 1.45 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD23 | 1:A:100:THR:H | 12 | 1.45 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 8 | 1.45 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD12 | 8 | 1.45 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD13 | 8 | 1.45 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG3 | 16 | 1.45 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG3 | 16 | 1.45 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG3 | 16 | 1.45 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 17 | 1.45 |
| (1,1937) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:H | 13 | 1.45 |
| (1,1659) | 1:A:20:LYS:HB2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 5 | 1.45 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 12 | 1.44 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 12 | 1.44 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 12 | 1.44 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD21 | 10 | 1.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD22 | 10 | 1.44 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD23 | 10 | 1.44 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 6 | 1.44 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD12 | 6 | 1.44 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD13 | 6 | 1.44 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG3 | 5 | 1.44 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG3 | 5 | 1.44 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG3 | 5 | 1.44 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD11 | 15 | 1.44 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD12 | 15 | 1.44 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD13 | 15 | 1.44 |
| (1,1937) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:H | 5 | 1.44 |
| (1,1699) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:H | 14 | 1.44 |
| (1,1699) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:H | 14 | 1.44 |
| (1,1699) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:H | 14 | 1.44 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE1 | 1:A:83:SER:HB3 | 10 | 1.44 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE2 | 1:A:83:SER:HB3 | 10 | 1.44 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE3 | 1:A:83:SER:HB3 | 10 | 1.44 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 14 | 1.43 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 14 | 1.43 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 14 | 1.43 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 12 | 1.43 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 12 | 1.43 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 12 | 1.43 |
| (1,651) | 1:A:95:THR:HB | 1:A:98:GLN:HB2 | 14 | 1.43 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB2 | 17 | 1.43 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB2 | 17 | 1.43 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB2 | 17 | 1.43 |
| (1,448) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 10 | 1.43 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 2 | 1.43 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 2 | 1.43 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 2 | 1.43 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 9 | 1.43 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 9 | 1.43 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 9 | 1.43 |
| (1,1972) | 1:A:8:GLN:HG2 | 1:A:35:GLU:H | 11 | 1.43 |
| (1,1937) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:H | 9 | 1.43 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG11 | 12 | 1.43 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG12 | 12 | 1.43 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG13 | 12 | 1.43 |
| (1,1843) | 1:A:23:THR:H | 1:A:74:GLN:HE21 | 17 | 1.43 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:100:THR:H | 13 | 1.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:100:THR:H | 13 | 1.43 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:100:THR:H | 13 | 1.43 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:81:THR:H | 9 | 1.42 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:81:THR:H | 9 | 1.42 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:81:THR:H | 9 | 1.42 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 13 | 1.42 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 13 | 1.42 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 13 | 1.42 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 17 | 1.42 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 17 | 1.42 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 17 | 1.42 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB2 | 5 | 1.42 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB2 | 5 | 1.42 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB2 | 5 | 1.42 |
| (1,448) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 5 | 1.42 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 4 | 1.42 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 4 | 1.42 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 4 | 1.42 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 5 | 1.42 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 5 | 1.42 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 5 | 1.42 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD11 | 5 | 1.42 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD12 | 5 | 1.42 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD13 | 5 | 1.42 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 1.42 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 1.42 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 1.42 |
| (1,1277) | 1:A:13:VAL:HA | 1:A:110:TYR:HB2 | 18 | 1.42 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD11 | 17 | 1.41 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD12 | 17 | 1.41 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD13 | 17 | 1.41 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD11 | 17 | 1.41 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD12 | 17 | 1.41 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD13 | 17 | 1.41 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD11 | 17 | 1.41 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD12 | 17 | 1.41 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD13 | 17 | 1.41 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 4 | 1.41 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 4 | 1.41 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 4 | 1.41 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 16 | 1.41 |
| (1,1802) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:H | 16 | 1.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD11 | 16 | 1.41 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD12 | 16 | 1.41 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD13 | 16 | 1.41 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD11 | 16 | 1.41 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD12 | 16 | 1.41 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD13 | 16 | 1.41 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD11 | 16 | 1.41 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD12 | 16 | 1.41 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD13 | 16 | 1.41 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD11 | 19 | 1.41 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD12 | 19 | 1.41 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD13 | 19 | 1.41 |
| (1,1100) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HA | 3 | 1.41 |
| (1,1100) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HA | 3 | 1.41 |
| (1,1100) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HA | 3 | 1.41 |
| (1,1084) | 1:A:43:MET:HA | 1:A:75:LEU:HD21 | 5 | 1.41 |
| (1,1084) | 1:A:43:MET:HA | 1:A:75:LEU:HD22 | 5 | 1.41 |
| (1,1084) | 1:A:43:MET:HA | 1:A:75:LEU:HD23 | 5 | 1.41 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:100:THR:H | 19 | 1.41 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:100:THR:H | 19 | 1.41 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:100:THR:H | 19 | 1.41 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 2 | 1.4 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 2 | 1.4 |
| (1,980) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 2 | 1.4 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:100:THR:H | 9 | 1.4 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:100:THR:H | 9 | 1.4 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:100:THR:H | 9 | 1.4 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG2 | 11 | 1.4 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG2 | 11 | 1.4 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG2 | 11 | 1.4 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 9 | 1.4 |
| (1,1802) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:H | 9 | 1.4 |
| (1,1659) | 1:A:20:LYS:HB2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 19 | 1.4 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 19 | 1.4 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 19 | 1.4 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 19 | 1.4 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 3 | 1.39 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 3 | 1.39 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 3 | 1.39 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 17 | 1.39 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 17 | 1.39 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 17 | 1.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 17 | 1.39 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 17 | 1.39 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 17 | 1.39 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 11 | 1.39 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 11 | 1.39 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 11 | 1.39 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG2 | 17 | 1.39 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG2 | 17 | 1.39 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG2 | 17 | 1.39 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 10 | 1.39 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD11 | 6 | 1.39 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD12 | 6 | 1.39 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD13 | 6 | 1.39 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD11 | 14 | 1.39 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD12 | 14 | 1.39 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD13 | 14 | 1.39 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 1.39 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 1.39 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 1.39 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 5 | 1.39 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 5 | 1.39 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 5 | 1.39 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 16 | 1.39 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 16 | 1.39 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 16 | 1.39 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 14 | 1.38 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 14 | 1.38 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 14 | 1.38 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:100:THR:H | 13 | 1.38 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:100:THR:H | 13 | 1.38 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:100:THR:H | 13 | 1.38 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD21 | 12 | 1.38 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD22 | 12 | 1.38 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD23 | 12 | 1.38 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:H | 7 | 1.38 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:H | 7 | 1.38 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:H | 7 | 1.38 |
| (1,608) | 1:A:98:GLN:HA | 1:A:111:LYS:HD2 | 5 | 1.38 |
| (1,608) | 1:A:98:GLN:HA | 1:A:111:LYS:HD2 | 9 | 1.38 |
| (1,516) | 1:A:57:GLU:HB2 | 1:A:91:GLN:HE22 | 13 | 1.38 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 1 | 1.38 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB2 | 1:A:75:LEU:HB3 | 13 | 1.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB3 | 1:A:75:LEU:HB3 | 13 | 1.38 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 10 | 1.38 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 10 | 1.38 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 10 | 1.38 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 11 | 1.38 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 11 | 1.38 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 11 | 1.38 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 18 | 1.38 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 18 | 1.38 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 18 | 1.38 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE2 | 2 | 1.38 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE3 | 2 | 1.38 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE2 | 2 | 1.38 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE3 | 2 | 1.38 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE2 | 2 | 1.38 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE3 | 2 | 1.38 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:H | 6 | 1.37 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:H | 6 | 1.37 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:H | 6 | 1.37 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD11 | 16 | 1.37 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD12 | 16 | 1.37 |
| (1,804) | 1:A:97:ASN:HD21 | 1:A:112:LEU:HD13 | 16 | 1.37 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 4 | 1.37 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 4 | 1.37 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 4 | 1.37 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HB2 | 7 | 1.37 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HB2 | 7 | 1.37 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HB2 | 7 | 1.37 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 7 | 1.37 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 7 | 1.37 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 7 | 1.37 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 13 | 1.37 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 13 | 1.37 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 13 | 1.37 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 2 | 1.37 |
| (1,1937) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:H | 10 | 1.37 |
| (1,1937) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:H | 11 | 1.37 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 1.37 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 1.37 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 1.37 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:110:TYR:HB2 | 17 | 1.37 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:110:TYR:HB2 | 17 | 1.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:110:TYR:HB2 | 17 | 1.37 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG21 | 19 | 1.36 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG22 | 19 | 1.36 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG23 | 19 | 1.36 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 15 | 1.36 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 15 | 1.36 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 15 | 1.36 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB3 | 10 | 1.36 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB3 | 10 | 1.36 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB3 | 10 | 1.36 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 1 | 1.36 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 1 | 1.36 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 1 | 1.36 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 14 | 1.36 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 14 | 1.36 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 14 | 1.36 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 12 | 1.36 |
| (1,1843) | 1:A:23:THR:H | 1:A:74:GLN:HE21 | 4 | 1.36 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:110:TYR:HB2 | 7 | 1.36 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:110:TYR:HB2 | 7 | 1.36 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:110:TYR:HB2 | 7 | 1.36 |
| (1,1121) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 12 | 1.36 |
| (1,1121) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 12 | 1.36 |
| (1,1121) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 12 | 1.36 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:81:THR:H | 14 | 1.35 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:81:THR:H | 14 | 1.35 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:81:THR:H | 14 | 1.35 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:H | 19 | 1.35 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:H | 19 | 1.35 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:H | 19 | 1.35 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD21 | 7 | 1.35 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD22 | 7 | 1.35 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD23 | 7 | 1.35 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD21 | 7 | 1.35 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD22 | 7 | 1.35 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD23 | 7 | 1.35 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD21 | 7 | 1.35 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD22 | 7 | 1.35 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD23 | 7 | 1.35 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 10 | 1.35 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 10 | 1.35 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 10 | 1.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,277) | 1:A:44:CYS:HB2 | 1:A:45:ASN:HD22 | 3 | 1.35 |
| (1,2091) | 1:A:91:GLN:HE22 | 1:A:103:THR:HA | 5 | 1.35 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 17 | 1.35 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 6 | 1.35 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 18 | 1.35 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 18 | 1.35 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 18 | 1.35 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE1 | 1:A:83:SER:HB3 | 11 | 1.35 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE2 | 1:A:83:SER:HB3 | 11 | 1.35 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE3 | 1:A:83:SER:HB3 | 11 | 1.35 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD11 | 15 | 1.35 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD12 | 15 | 1.35 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD13 | 15 | 1.35 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:110:TYR:HB2 | 5 | 1.35 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:110:TYR:HB2 | 5 | 1.35 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:110:TYR:HB2 | 5 | 1.35 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HA | 2 | 1.35 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HA | 2 | 1.35 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HA | 2 | 1.35 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB1 | 15 | 1.35 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB2 | 15 | 1.35 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB3 | 15 | 1.35 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG21 | 17 | 1.35 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG22 | 17 | 1.35 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG23 | 17 | 1.35 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:H | 9 | 1.34 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:H | 9 | 1.34 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:H | 9 | 1.34 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:H | 13 | 1.34 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:H | 13 | 1.34 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:H | 13 | 1.34 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD21 | 19 | 1.34 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD22 | 19 | 1.34 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD23 | 19 | 1.34 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB2 | 11 | 1.34 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB2 | 11 | 1.34 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB2 | 11 | 1.34 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 18 | 1.34 |
| (1,1937) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:H | 2 | 1.34 |
| (1,1802) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:H | 14 | 1.34 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE1 | 1:A:83:SER:HB3 | 8 | 1.34 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE2 | 1:A:83:SER:HB3 | 8 | 1.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE3 | 1:A:83:SER:HB3 | 8 | 1.34 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 3 | 1.34 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 3 | 1.34 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 3 | 1.34 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 9 | 1.34 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 9 | 1.34 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 9 | 1.34 |
| (1,1174) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HG3 | 19 | 1.34 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:H | 1 | 1.33 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:H | 1 | 1.33 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:H | 1 | 1.33 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD11 | 6 | 1.33 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD12 | 6 | 1.33 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD13 | 6 | 1.33 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD11 | 6 | 1.33 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD12 | 6 | 1.33 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD13 | 6 | 1.33 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD11 | 6 | 1.33 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD12 | 6 | 1.33 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD13 | 6 | 1.33 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 17 | 1.33 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD12 | 17 | 1.33 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD13 | 17 | 1.33 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:81:THR:HB | 7 | 1.33 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:81:THR:HB | 7 | 1.33 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:81:THR:HB | 7 | 1.33 |
| (1,688) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:29:PRO:HB2 | 3 | 1.33 |
| (1,688) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:29:PRO:HB2 | 3 | 1.33 |
| (1,688) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:29:PRO:HB2 | 3 | 1.33 |
| (1,2091) | 1:A:91:GLN:HE22 | 1:A:103:THR:HA | 2 | 1.33 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 8 | 1.33 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 12 | 1.33 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 12 | 1.33 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 12 | 1.33 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HA | 1 | 1.33 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HA | 1 | 1.33 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HA | 1 | 1.33 |
| (1,270) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:45:ASN:HD22 | 11 | 1.32 |
| (1,1937) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:H | 19 | 1.32 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE1 | 16 | 1.32 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE2 | 16 | 1.32 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE3 | 16 | 1.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD11 | 3 | 1.32 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD12 | 3 | 1.32 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD13 | 3 | 1.32 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD11 | 3 | 1.32 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD12 | 3 | 1.32 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD13 | 3 | 1.32 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD11 | 3 | 1.32 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD12 | 3 | 1.32 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD13 | 3 | 1.32 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE1 | 6 | 1.32 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE2 | 6 | 1.32 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE3 | 6 | 1.32 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 4 | 1.31 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 4 | 1.31 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 4 | 1.31 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG21 | 8 | 1.31 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG22 | 8 | 1.31 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG23 | 8 | 1.31 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:H | 10 | 1.31 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:H | 10 | 1.31 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:H | 10 | 1.31 |
| (1,448) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 8 | 1.31 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 7 | 1.31 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD11 | 13 | 1.31 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD12 | 13 | 1.31 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD13 | 13 | 1.31 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 5 | 1.31 |
| (1,1937) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:H | 12 | 1.31 |
| (1,1277) | 1:A:13:VAL:HA | 1:A:110:TYR:HB2 | 4 | 1.31 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG21 | 13 | 1.3 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG22 | 13 | 1.3 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG23 | 13 | 1.3 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG21 | 18 | 1.3 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG22 | 18 | 1.3 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG23 | 18 | 1.3 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:H | 4 | 1.3 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:H | 4 | 1.3 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:H | 4 | 1.3 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:100:THR:H | 8 | 1.3 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:100:THR:H | 8 | 1.3 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:100:THR:H | 8 | 1.3 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD21 | 1:A:100:THR:H | 7 | 1.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD22 | 1:A:100:THR:H | 7 | 1.3 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD23 | 1:A:100:THR:H | 7 | 1.3 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 16 | 1.3 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD11 | 12 | 1.3 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD12 | 12 | 1.3 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD13 | 12 | 1.3 |
| (1,1724) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:106:GLN:HE22 | 8 | 1.3 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG21 | 10 | 1.29 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG22 | 10 | 1.29 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG23 | 10 | 1.29 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG21 | 11 | 1.29 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG22 | 11 | 1.29 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG23 | 11 | 1.29 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HB2 | 10 | 1.29 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HB2 | 10 | 1.29 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HB2 | 10 | 1.29 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HB2 | 16 | 1.29 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HB2 | 16 | 1.29 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HB2 | 16 | 1.29 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 9 | 1.29 |
| (1,2148) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 4 | 1.29 |
| (1,2148) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 7 | 1.29 |
| (1,2148) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 9 | 1.29 |
| (1,2148) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 12 | 1.29 |
| (1,2141) | 1:A:106:GLN:HE21 | 1:A:108:LEU:HD21 | 7 | 1.29 |
| (1,2141) | 1:A:106:GLN:HE21 | 1:A:108:LEU:HD22 | 7 | 1.29 |
| (1,2141) | 1:A:106:GLN:HE21 | 1:A:108:LEU:HD23 | 7 | 1.29 |
| (1,1937) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:H | 6 | 1.29 |
| (1,182) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:45:ASN:HB3 | 11 | 1.29 |
| (1,1659) | 1:A:20:LYS:HB2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 10 | 1.29 |
| (1,1174) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HG3 | 6 | 1.29 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 12 | 1.29 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 12 | 1.29 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 12 | 1.29 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 2 | 1.28 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 2 | 1.28 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 2 | 1.28 |
| (1,617) | 1:A:31:ILE:HG12 | 1:A:41:GLY:HA2 | 15 | 1.28 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB3 | 6 | 1.28 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB3 | 6 | 1.28 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB3 | 6 | 1.28 |
| (1,440) | 1:A:68:MET:HB3 | 1:A:69:MET:HA | 8 | 1.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG2 | 2 | 1.28 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG2 | 2 | 1.28 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG2 | 2 | 1.28 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 19 | 1.28 |
| (1,2148) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 1 | 1.28 |
| (1,2148) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 2 | 1.28 |
| (1,2148) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 3 | 1.28 |
| (1,2148) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 6 | 1.28 |
| (1,2148) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 8 | 1.28 |
| (1,2148) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 10 | 1.28 |
| (1,2148) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 13 | 1.28 |
| (1,2148) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 14 | 1.28 |
| (1,2148) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 15 | 1.28 |
| (1,2148) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 16 | 1.28 |
| (1,2148) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 18 | 1.28 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE1 | 14 | 1.28 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE2 | 14 | 1.28 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE3 | 14 | 1.28 |
| (1,1699) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:H | 1 | 1.28 |
| (1,1699) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:H | 1 | 1.28 |
| (1,1699) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:H | 1 | 1.28 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG21 | 13 | 1.28 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG22 | 13 | 1.28 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG23 | 13 | 1.28 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG21 | 2 | 1.27 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG22 | 2 | 1.27 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG23 | 2 | 1.27 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG21 | 4 | 1.27 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG22 | 4 | 1.27 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG23 | 4 | 1.27 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:100:THR:H | 4 | 1.27 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:100:THR:H | 4 | 1.27 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:100:THR:H | 4 | 1.27 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 8 | 1.27 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 8 | 1.27 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 8 | 1.27 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG2 | 1 | 1.27 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG2 | 1 | 1.27 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG2 | 1 | 1.27 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB2 | 1:A:75:LEU:HB3 | 7 | 1.27 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB3 | 1:A:75:LEU:HB3 | 7 | 1.27 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 4 | 1.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2016) | 1:A:106:GLN:HE22 | 1:A:107:THR:H | 15 | 1.27 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 13 | 1.27 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE1 | 1:A:117:ASN:HB3 | 5 | 1.27 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE2 | 1:A:117:ASN:HB3 | 5 | 1.27 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE3 | 1:A:117:ASN:HB3 | 5 | 1.27 |
| (1,1277) | 1:A:13:VAL:HA | 1:A:110:TYR:HB2 | 10 | 1.27 |
| (1,117) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 9 | 1.27 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 5 | 1.26 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 5 | 1.26 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 5 | 1.26 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 3 | 1.26 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 3 | 1.26 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 3 | 1.26 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 8 | 1.26 |
| (1,1972) | 1:A:8:GLN:HG2 | 1:A:35:GLU:H | 16 | 1.26 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 7 | 1.26 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 7 | 1.26 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 7 | 1.26 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 11 | 1.26 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 11 | 1.26 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 11 | 1.26 |
| (1,1277) | 1:A:13:VAL:HA | 1:A:110:TYR:HB2 | 12 | 1.26 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:110:TYR:HB2 | 1 | 1.26 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:110:TYR:HB2 | 1 | 1.26 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:110:TYR:HB2 | 1 | 1.26 |
| (1,1098) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:16:SER:H | 14 | 1.26 |
| (1,1098) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:16:SER:H | 14 | 1.26 |
| (1,1098) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:16:SER:H | 14 | 1.26 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG21 | 15 | 1.26 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG22 | 15 | 1.26 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG23 | 15 | 1.26 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG21 | 19 | 1.26 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG22 | 19 | 1.26 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG23 | 19 | 1.26 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 13 | 1.25 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 13 | 1.25 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 13 | 1.25 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:101:LEU:HD21 | 13 | 1.25 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:101:LEU:HD22 | 13 | 1.25 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:101:LEU:HD23 | 13 | 1.25 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:101:LEU:HD21 | 13 | 1.25 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:101:LEU:HD22 | 13 | 1.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:101:LEU:HD23 | 13 | 1.25 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:101:LEU:HD21 | 13 | 1.25 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:101:LEU:HD22 | 13 | 1.25 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:101:LEU:HD23 | 13 | 1.25 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD11 | 11 | 1.25 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD12 | 11 | 1.25 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD13 | 11 | 1.25 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 11 | 1.25 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 11 | 1.25 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 11 | 1.25 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD21 | 9 | 1.25 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD22 | 9 | 1.25 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD23 | 9 | 1.25 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 14 | 1.25 |
| (1,310) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:111:LYS:HG3 | 10 | 1.25 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 1 | 1.25 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD11 | 9 | 1.25 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD12 | 9 | 1.25 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD13 | 9 | 1.25 |
| (1,1937) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:H | 18 | 1.25 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG11 | 18 | 1.25 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG12 | 18 | 1.25 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG13 | 18 | 1.25 |
| (1,1277) | 1:A:13:VAL:HA | 1:A:110:TYR:HB2 | 8 | 1.25 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 18 | 1.25 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 18 | 1.25 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 18 | 1.25 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 19 | 1.25 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 19 | 1.25 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 19 | 1.25 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:100:THR:H | 10 | 1.25 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:100:THR:H | 10 | 1.25 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:100:THR:H | 10 | 1.25 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:100:THR:H | 15 | 1.25 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:100:THR:H | 15 | 1.25 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:100:THR:H | 15 | 1.25 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 16 | 1.24 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 16 | 1.24 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 16 | 1.24 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:100:THR:H | 18 | 1.24 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:100:THR:H | 18 | 1.24 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:100:THR:H | 18 | 1.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 12 | 1.24 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 12 | 1.24 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 12 | 1.24 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD21 | 12 | 1.24 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD22 | 12 | 1.24 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD23 | 12 | 1.24 |
| (1,686) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:29:PRO:HB3 | 14 | 1.24 |
| (1,686) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:29:PRO:HB3 | 14 | 1.24 |
| (1,686) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:29:PRO:HB3 | 14 | 1.24 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG3 | 17 | 1.24 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG3 | 17 | 1.24 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG3 | 17 | 1.24 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 11 | 1.24 |
| (1,1174) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HG3 | 2 | 1.24 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 10 | 1.23 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 10 | 1.23 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 10 | 1.23 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD11 | 10 | 1.23 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD12 | 10 | 1.23 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD13 | 10 | 1.23 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD11 | 10 | 1.23 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD12 | 10 | 1.23 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD13 | 10 | 1.23 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD11 | 10 | 1.23 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD12 | 10 | 1.23 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD13 | 10 | 1.23 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD21 | 1:A:100:THR:H | 6 | 1.23 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD22 | 1:A:100:THR:H | 6 | 1.23 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD23 | 1:A:100:THR:H | 6 | 1.23 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD21 | 1:A:100:THR:H | 10 | 1.23 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD22 | 1:A:100:THR:H | 10 | 1.23 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD23 | 1:A:100:THR:H | 10 | 1.23 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:81:THR:HB | 12 | 1.23 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:81:THR:HB | 12 | 1.23 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:81:THR:HB | 12 | 1.23 |
| (1,692) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:29:PRO:HA | 3 | 1.23 |
| (1,692) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:29:PRO:HA | 3 | 1.23 |
| (1,692) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:29:PRO:HA | 3 | 1.23 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 12 | 1.23 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 19 | 1.23 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE1 | 11 | 1.23 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE2 | 11 | 1.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE3 | 11 | 1.23 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 14 | 1.23 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 14 | 1.23 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 14 | 1.23 |
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 16 | 1.23 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HA | 5 | 1.23 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HA | 5 | 1.23 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HA | 5 | 1.23 |
| (1,1095) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:H | 3 | 1.23 |
| (1,1095) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:H | 3 | 1.23 |
| (1,1095) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:H | 3 | 1.23 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG21 | 9 | 1.23 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG22 | 9 | 1.23 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG23 | 9 | 1.23 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 18 | 1.22 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 18 | 1.22 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 18 | 1.22 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG21 | 5 | 1.22 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG22 | 5 | 1.22 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG23 | 5 | 1.22 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG21 | 6 | 1.22 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG22 | 6 | 1.22 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG23 | 6 | 1.22 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG21 | 16 | 1.22 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG22 | 16 | 1.22 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG23 | 16 | 1.22 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:H | 13 | 1.22 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:H | 13 | 1.22 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:H | 13 | 1.22 |
| (1,651) | 1:A:95:THR:HB | 1:A:98:GLN:HB2 | 6 | 1.22 |
| (1,1710) | 1:A:39:ILE:H | 1:A:48:SER:HB2 | 2 | 1.22 |
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 1 | 1.22 |
| (1,1174) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HG3 | 14 | 1.22 |
| (1,117) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 2 | 1.22 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:110:TYR:HB2 | 8 | 1.22 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:110:TYR:HB2 | 8 | 1.22 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:110:TYR:HB2 | 8 | 1.22 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 6 | 1.21 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 6 | 1.21 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 6 | 1.21 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG21 | 14 | 1.21 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG22 | 14 | 1.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG23 | 14 | 1.21 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG21 | 15 | 1.21 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG22 | 15 | 1.21 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG23 | 15 | 1.21 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:HB2 | 6 | 1.21 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:HB2 | 6 | 1.21 |
| (1,951) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:HB2 | 6 | 1.21 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD11 | 9 | 1.21 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD12 | 9 | 1.21 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD13 | 9 | 1.21 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD11 | 9 | 1.21 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD12 | 9 | 1.21 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD13 | 9 | 1.21 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD11 | 9 | 1.21 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD12 | 9 | 1.21 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD13 | 9 | 1.21 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 12 | 1.21 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 12 | 1.21 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 12 | 1.21 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 14 | 1.21 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 14 | 1.21 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 14 | 1.21 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD11 | 8 | 1.21 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD12 | 8 | 1.21 |
| (1,802) | 1:A:97:ASN:H | 1:A:112:LEU:HD13 | 8 | 1.21 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 5 | 1.21 |
| (1,2130) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:7:LEU:HG | 8 | 1.21 |
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 13 | 1.21 |
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 15 | 1.21 |
| (1,117) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 19 | 1.21 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG21 | 10 | 1.21 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG22 | 10 | 1.21 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG23 | 10 | 1.21 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 15 | 1.2 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 15 | 1.2 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 15 | 1.2 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG21 | 1 | 1.2 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG22 | 1 | 1.2 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG23 | 1 | 1.2 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:100:THR:H | 12 | 1.2 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:100:THR:H | 12 | 1.2 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:100:THR:H | 12 | 1.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD11 | 14 | 1.2 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD12 | 14 | 1.2 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD13 | 14 | 1.2 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD11 | 14 | 1.2 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD12 | 14 | 1.2 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD13 | 14 | 1.2 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD11 | 14 | 1.2 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD12 | 14 | 1.2 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD13 | 14 | 1.2 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 4 | 1.2 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 4 | 1.2 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 4 | 1.2 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB3 | 1 | 1.2 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB3 | 1 | 1.2 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB3 | 1 | 1.2 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 11 | 1.2 |
| (1,2130) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:7:LEU:HG | 3 | 1.2 |
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 6 | 1.2 |
| (1,1096) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:15:GLU:H | 6 | 1.2 |
| (1,1096) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:15:GLU:H | 6 | 1.2 |
| (1,1096) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:15:GLU:H | 6 | 1.2 |
| (1,1096) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:15:GLU:H | 17 | 1.2 |
| (1,1096) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:15:GLU:H | 17 | 1.2 |
| (1,1096) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:15:GLU:H | 17 | 1.2 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG21 | 3 | 1.19 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG22 | 3 | 1.19 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG23 | 3 | 1.19 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG21 | 9 | 1.19 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG22 | 9 | 1.19 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG23 | 9 | 1.19 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 1.19 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 1.19 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 1.19 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 1.19 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 1.19 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 1.19 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 1.19 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 1.19 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 1.19 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 1.19 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 1.19 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 1.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 1.19 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 1.19 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 1.19 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 1.19 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 1.19 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 1.19 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:H | 8 | 1.19 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:H | 8 | 1.19 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:H | 8 | 1.19 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 6 | 1.19 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 6 | 1.19 |
| (1,918) | 1:A:93:ASP:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 6 | 1.19 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD11 | 13 | 1.19 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD12 | 13 | 1.19 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD13 | 13 | 1.19 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD11 | 13 | 1.19 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD12 | 13 | 1.19 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD13 | 13 | 1.19 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD11 | 13 | 1.19 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD12 | 13 | 1.19 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD13 | 13 | 1.19 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 8 | 1.19 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 8 | 1.19 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 8 | 1.19 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 1.19 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 1.19 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 1.19 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 1.19 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 1.19 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 1.19 |
| (1,596) | 1:A:76:ASN:H | 1:A:77:GLU:HB2 | 19 | 1.19 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 3 | 1.19 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HB2 | 15 | 1.19 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HB2 | 15 | 1.19 |
| (1,241) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HB2 | 15 | 1.19 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 1.19 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 1.19 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 1.19 |
| (1,1401) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HB3 | 12 | 1.19 |
| (1,1401) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HB3 | 12 | 1.19 |
| (1,1401) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HB3 | 12 | 1.19 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE1 | 1:A:83:SER:HB3 | 16 | 1.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE2 | 1:A:83:SER:HB3 | 16 | 1.19 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE3 | 1:A:83:SER:HB3 | 16 | 1.19 |
| (1,1061) | 1:A:46:ARG:HG3 | 1:A:66:THR:HG21 | 7 | 1.19 |
| (1,1061) | 1:A:46:ARG:HG3 | 1:A:66:THR:HG22 | 7 | 1.19 |
| (1,1061) | 1:A:46:ARG:HG3 | 1:A:66:THR:HG23 | 7 | 1.19 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 10 | 1.18 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 10 | 1.18 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 10 | 1.18 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 8 | 1.18 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 8 | 1.18 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 8 | 1.18 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 1.18 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 1.18 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 1.18 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 1.18 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 1.18 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 1.18 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 1.18 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 1.18 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 1.18 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 1.18 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 1.18 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 1.18 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 1.18 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 1.18 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 1.18 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 1.18 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 1.18 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 1.18 |
| (1,440) | 1:A:68:MET:HB3 | 1:A:69:MET:HA | 5 | 1.18 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 6 | 1.18 |
| (1,2091) | 1:A:91:GLN:HE22 | 1:A:103:THR:HA | 4 | 1.18 |
| (1,2071) | 1:A:103:THR:H | 1:A:105:LYS:HB2 | 16 | 1.18 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 1.18 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 1.18 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 1.18 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 12 | 1.18 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 12 | 1.18 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 12 | 1.18 |
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 9 | 1.18 |
| (1,1061) | 1:A:46:ARG:HG3 | 1:A:66:THR:HG21 | 17 | 1.18 |
| (1,1061) | 1:A:46:ARG:HG3 | 1:A:66:THR:HG22 | 17 | 1.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1061) | 1:A:46:ARG:HG3 | 1:A:66:THR:HG23 | 17 | 1.18 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG21 | 5 | 1.18 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG22 | 5 | 1.18 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG23 | 5 | 1.18 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 5 | 1.17 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 5 | 1.17 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 5 | 1.17 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 5 | 1.17 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 5 | 1.17 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 5 | 1.17 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 9 | 1.17 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 9 | 1.17 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 9 | 1.17 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 13 | 1.17 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 13 | 1.17 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 13 | 1.17 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:81:THR:H | 17 | 1.17 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:81:THR:H | 17 | 1.17 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:81:THR:H | 17 | 1.17 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:H | 9 | 1.17 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:H | 9 | 1.17 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:H | 9 | 1.17 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD11 | 19 | 1.17 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD12 | 19 | 1.17 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD13 | 19 | 1.17 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD11 | 19 | 1.17 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD12 | 19 | 1.17 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD13 | 19 | 1.17 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD11 | 19 | 1.17 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD12 | 19 | 1.17 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD13 | 19 | 1.17 |
| (1,794) | 1:A:70:CYS:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 5 | 1.17 |
| (1,794) | 1:A:70:CYS:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 5 | 1.17 |
| (1,794) | 1:A:70:CYS:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 5 | 1.17 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 18 | 1.17 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 18 | 1.17 |
| (1,780) | 1:A:6:GLN:HB2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 18 | 1.17 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 1.17 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 1.17 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 1.17 |
| (1,448) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 3 | 1.17 |
| (1,440) | 1:A:68:MET:HB3 | 1:A:69:MET:HA | 10 | 1.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,248) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:H | 9 | 1.17 |
| (1,248) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:H | 11 | 1.17 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB2 | 1:A:75:LEU:HB3 | 18 | 1.17 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB3 | 1:A:75:LEU:HB3 | 18 | 1.17 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE1 | 1:A:83:SER:HB3 | 5 | 1.17 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE2 | 1:A:83:SER:HB3 | 5 | 1.17 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE3 | 1:A:83:SER:HB3 | 5 | 1.17 |
| (1,1277) | 1:A:13:VAL:HA | 1:A:110:TYR:HB2 | 19 | 1.17 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB1 | 16 | 1.17 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB2 | 16 | 1.17 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB3 | 16 | 1.17 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB1 | 16 | 1.17 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB2 | 16 | 1.17 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB3 | 16 | 1.17 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB1 | 16 | 1.17 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB2 | 16 | 1.17 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB3 | 16 | 1.17 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HA | 6 | 1.17 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HA | 6 | 1.17 |
| (1,1167) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HA | 6 | 1.17 |
| (1,1098) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:16:SER:H | 6 | 1.17 |
| (1,1098) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:16:SER:H | 6 | 1.17 |
| (1,1098) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:16:SER:H | 6 | 1.17 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG21 | 4 | 1.17 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG22 | 4 | 1.17 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG23 | 4 | 1.17 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 18 | 1.16 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 18 | 1.16 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 18 | 1.16 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:H | 17 | 1.16 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:H | 17 | 1.16 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:H | 17 | 1.16 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 9 | 1.16 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 9 | 1.16 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 9 | 1.16 |
| (1,692) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:29:PRO:HA | 14 | 1.16 |
| (1,692) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:29:PRO:HA | 14 | 1.16 |
| (1,692) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:29:PRO:HA | 14 | 1.16 |
| (1,608) | 1:A:98:GLN:HA | 1:A:111:LYS:HD2 | 7 | 1.16 |
| (1,399) | 1:A:85:MET:HB3 | 1:A:86:LEU:HD21 | 12 | 1.16 |
| (1,399) | 1:A:85:MET:HB3 | 1:A:86:LEU:HD22 | 12 | 1.16 |
| (1,399) | 1:A:85:MET:HB3 | 1:A:86:LEU:HD23 | 12 | 1.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,300) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 4 | 1.16 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 7 | 1.16 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 7 | 1.16 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 7 | 1.16 |
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 18 | 1.16 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD11 | 12 | 1.16 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD12 | 12 | 1.16 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD13 | 12 | 1.16 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:110:TYR:HB2 | 13 | 1.16 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:110:TYR:HB2 | 13 | 1.16 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:110:TYR:HB2 | 13 | 1.16 |
| (1,1096) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:15:GLU:H | 3 | 1.16 |
| (1,1096) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:15:GLU:H | 3 | 1.16 |
| (1,1096) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:15:GLU:H | 3 | 1.16 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG21 | 7 | 1.15 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG22 | 7 | 1.15 |
| (1,970) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:103:THR:HG23 | 7 | 1.15 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD21 | 8 | 1.15 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD22 | 8 | 1.15 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD23 | 8 | 1.15 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD21 | 8 | 1.15 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD22 | 8 | 1.15 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD23 | 8 | 1.15 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD21 | 8 | 1.15 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD22 | 8 | 1.15 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD23 | 8 | 1.15 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 16 | 1.15 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD12 | 16 | 1.15 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD13 | 16 | 1.15 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 1.15 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 1.15 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 1.15 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 1.15 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 1.15 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 1.15 |
| (1,300) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 10 | 1.15 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 10 | 1.15 |
| (1,2016) | 1:A:106:GLN:HE22 | 1:A:107:THR:H | 4 | 1.15 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 17 | 1.15 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 17 | 1.15 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 17 | 1.15 |
| (1,1277) | 1:A:13:VAL:HA | 1:A:110:TYR:HB2 | 17 | 1.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1098) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:16:SER:H | 3 | 1.15 |
| (1,1098) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:16:SER:H | 3 | 1.15 |
| (1,1098) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:16:SER:H | 3 | 1.15 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HD11 | 12 | 1.14 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HD12 | 12 | 1.14 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HD13 | 12 | 1.14 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HD11 | 12 | 1.14 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HD12 | 12 | 1.14 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HD13 | 12 | 1.14 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HD11 | 12 | 1.14 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HD12 | 12 | 1.14 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HD13 | 12 | 1.14 |
| (1,440) | 1:A:68:MET:HB3 | 1:A:69:MET:HA | 9 | 1.14 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD11 | 13 | 1.14 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD12 | 13 | 1.14 |
| (1,2193) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:58:LEU:HD13 | 13 | 1.14 |
| (1,2140) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:106:GLN:HE22 | 11 | 1.14 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 14 | 1.14 |
| (1,1094) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 12 | 1.14 |
| (1,1094) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 12 | 1.14 |
| (1,1094) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 12 | 1.14 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG21 | 8 | 1.14 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG22 | 8 | 1.14 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG23 | 8 | 1.14 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 4 | 1.13 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 4 | 1.13 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 4 | 1.13 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 17 | 1.13 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 17 | 1.13 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 17 | 1.13 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:81:THR:H | 4 | 1.13 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:81:THR:H | 4 | 1.13 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:81:THR:H | 4 | 1.13 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 11 | 1.13 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 11 | 1.13 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 11 | 1.13 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 11 | 1.13 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 11 | 1.13 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 11 | 1.13 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB2 | 10 | 1.13 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB2 | 10 | 1.13 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB2 | 10 | 1.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HB2 | 9 | 1.13 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HB2 | 9 | 1.13 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HB2 | 9 | 1.13 |
| (1,277) | 1:A:44:CYS:HB2 | 1:A:45:ASN:HD22 | 12 | 1.13 |
| (1,248) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:H | 2 | 1.13 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 12 | 1.13 |
| (1,1699) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:H | 12 | 1.13 |
| (1,1699) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:H | 12 | 1.13 |
| (1,1699) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:H | 12 | 1.13 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 16 | 1.13 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 16 | 1.13 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 16 | 1.13 |
| (1,123) | 1:A:63:LEU:HB2 | 1:A:87:LYS:HE2 | 12 | 1.13 |
| (1,123) | 1:A:63:LEU:HB2 | 1:A:87:LYS:HE3 | 12 | 1.13 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:H | 14 | 1.12 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:H | 14 | 1.12 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:H | 14 | 1.12 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:H | 15 | 1.12 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:H | 15 | 1.12 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:H | 15 | 1.12 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD21 | 11 | 1.12 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD22 | 11 | 1.12 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD23 | 11 | 1.12 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD21 | 7 | 1.12 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD22 | 7 | 1.12 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD23 | 7 | 1.12 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD21 | 9 | 1.12 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD22 | 9 | 1.12 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD23 | 9 | 1.12 |
| (1,286) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:57:GLU:HB2 | 8 | 1.12 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD11 | 10 | 1.12 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD12 | 10 | 1.12 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD13 | 10 | 1.12 |
| (1,2091) | 1:A:91:GLN:HE22 | 1:A:103:THR:HA | 1 | 1.12 |
| (1,209) | 1:A:113:ALA:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 19 | 1.12 |
| (1,1843) | 1:A:23:THR:H | 1:A:74:GLN:HE21 | 7 | 1.12 |
| (1,1782) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:H | 1 | 1.12 |
| (1,1782) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:H | 1 | 1.12 |
| (1,1782) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:H | 1 | 1.12 |
| (1,117) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 7 | 1.12 |
| (1,117) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 11 | 1.12 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:100:THR:H | 9 | 1.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:100:THR:H | 9 | 1.12 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:100:THR:H | 9 | 1.12 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 19 | 1.11 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 19 | 1.11 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 19 | 1.11 |
| (1,930) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:22:VAL:H | 16 | 1.11 |
| (1,448) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 14 | 1.11 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG2 | 7 | 1.11 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG2 | 7 | 1.11 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG2 | 7 | 1.11 |
| (1,1843) | 1:A:23:THR:H | 1:A:74:GLN:HE21 | 5 | 1.11 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 1.11 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 1.11 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 1.11 |
| (1,1405) | 1:A:8:GLN:HA | 1:A:8:GLN:HE22 | 10 | 1.11 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD11 | 16 | 1.11 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD12 | 16 | 1.11 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD13 | 16 | 1.11 |
| (1,118) | 1:A:47:PHE:HB2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 12 | 1.11 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:110:TYR:HB2 | 15 | 1.11 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:110:TYR:HB2 | 15 | 1.11 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:110:TYR:HB2 | 15 | 1.11 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG21 | 7 | 1.11 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG22 | 7 | 1.11 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG23 | 7 | 1.11 |
| (1,1103) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:109:THR:HB | 6 | 1.11 |
| (1,1103) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:109:THR:HB | 6 | 1.11 |
| (1,1103) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:109:THR:HB | 6 | 1.11 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG21 | 2 | 1.11 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG22 | 2 | 1.11 |
| (1,1003) | 1:A:91:GLN:HA | 1:A:92:VAL:HG23 | 2 | 1.11 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 9 | 1.1 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 9 | 1.1 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 9 | 1.1 |
| (1,798) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:78:LEU:HD21 | 11 | 1.1 |
| (1,798) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:78:LEU:HD22 | 11 | 1.1 |
| (1,798) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:78:LEU:HD23 | 11 | 1.1 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 4 | 1.1 |
| (1,303) | 1:A:64:ALA:HA | 1:A:65:MET:HB2 | 17 | 1.1 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 5 | 1.1 |
| (1,2148) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 11 | 1.1 |
| (1,2016) | 1:A:106:GLN:HE22 | 1:A:107:THR:H | 10 | 1.1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG11 | 2 | 1.1 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG12 | 2 | 1.1 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG13 | 2 | 1.1 |
| (1,1782) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:H | 13 | 1.1 |
| (1,1782) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:H | 13 | 1.1 |
| (1,1782) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:H | 13 | 1.1 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE2 | 6 | 1.1 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE3 | 6 | 1.1 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE2 | 6 | 1.1 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE3 | 6 | 1.1 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE2 | 6 | 1.1 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE3 | 6 | 1.1 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:100:THR:H | 17 | 1.1 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:100:THR:H | 17 | 1.1 |
| (1,1037) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:100:THR:H | 17 | 1.1 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 2 | 1.09 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 2 | 1.09 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 2 | 1.09 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD21 | 17 | 1.09 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD22 | 17 | 1.09 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD23 | 17 | 1.09 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB2 | 6 | 1.09 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB2 | 6 | 1.09 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB2 | 6 | 1.09 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD21 | 7 | 1.09 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD22 | 7 | 1.09 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD23 | 7 | 1.09 |
| (1,440) | 1:A:68:MET:HB3 | 1:A:69:MET:HA | 4 | 1.09 |
| (1,440) | 1:A:68:MET:HB3 | 1:A:69:MET:HA | 17 | 1.09 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG2 | 16 | 1.09 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG2 | 16 | 1.09 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG2 | 16 | 1.09 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 12 | 1.09 |
| (1,2158) | 1:A:48:SER:HB2 | 1:A:49:GLY:H | 16 | 1.09 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 4 | 1.09 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 11 | 1.09 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 11 | 1.09 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 11 | 1.09 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 3 | 1.09 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 7 | 1.09 |
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 19 | 1.09 |
| (1,117) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 13 | 1.09 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 19 | 1.08 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 19 | 1.08 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 19 | 1.08 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:81:THR:H | 8 | 1.08 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:81:THR:H | 8 | 1.08 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:81:THR:H | 8 | 1.08 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:81:THR:H | 12 | 1.08 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:81:THR:H | 12 | 1.08 |
| (1,971) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:81:THR:H | 12 | 1.08 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:H | 7 | 1.08 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:H | 7 | 1.08 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:H | 7 | 1.08 |
| (1,880) | 1:A:98:GLN:HA | 1:A:111:LYS:HG3 | 9 | 1.08 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD21 | 4 | 1.08 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD22 | 4 | 1.08 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD23 | 4 | 1.08 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD21 | 19 | 1.08 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD22 | 19 | 1.08 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD23 | 19 | 1.08 |
| (1,638) | 1:A:26:LYS:HA | 1:A:26:LYS:HD3 | 18 | 1.08 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 15 | 1.08 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD11 | 3 | 1.08 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD12 | 3 | 1.08 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD13 | 3 | 1.08 |
| (1,1792) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 19 | 1.08 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 4 | 1.08 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 4 | 1.08 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 4 | 1.08 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE1 | 1:A:83:SER:HB3 | 14 | 1.08 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE2 | 1:A:83:SER:HB3 | 14 | 1.08 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE3 | 1:A:83:SER:HB3 | 14 | 1.08 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE1 | 13 | 1.08 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE2 | 13 | 1.08 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE3 | 13 | 1.08 |
| (1,1277) | 1:A:13:VAL:HA | 1:A:110:TYR:HB2 | 15 | 1.08 |
| (1,117) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 14 | 1.08 |
| (1,117) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 18 | 1.08 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG21 | 10 | 1.08 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG22 | 10 | 1.08 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG23 | 10 | 1.08 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 8 | 1.07 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 8 | 1.07 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 8 | 1.07 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 11 | 1.07 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 11 | 1.07 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 11 | 1.07 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 3 | 1.07 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 3 | 1.07 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 3 | 1.07 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 5 | 1.07 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 5 | 1.07 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 5 | 1.07 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 16 | 1.07 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 16 | 1.07 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 16 | 1.07 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 6 | 1.07 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 6 | 1.07 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 6 | 1.07 |
| (1,848) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:84:GLU:HB2 | 6 | 1.07 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD11 | 8 | 1.07 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD12 | 8 | 1.07 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD13 | 8 | 1.07 |
| (1,277) | 1:A:44:CYS:HB2 | 1:A:45:ASN:HD22 | 16 | 1.07 |
| (1,2098) | 1:A:72:ASN:HD21 | 1:A:74:GLN:HB2 | 10 | 1.07 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE1 | 1 | 1.07 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE2 | 1 | 1.07 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE3 | 1 | 1.07 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 12 | 1.07 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE1 | 1:A:117:ASN:HB3 | 3 | 1.07 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE2 | 1:A:117:ASN:HB3 | 3 | 1.07 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE3 | 1:A:117:ASN:HB3 | 3 | 1.07 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 10 | 1.07 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 10 | 1.07 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 10 | 1.07 |
| (1,1100) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HA | 17 | 1.07 |
| (1,1100) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HA | 17 | 1.07 |
| (1,1100) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HA | 17 | 1.07 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 13 | 1.06 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 13 | 1.06 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 13 | 1.06 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 9 | 1.06 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 9 | 1.06 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 9 | 1.06 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD11 | 9 | 1.06 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD12 | 9 | 1.06 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD13 | 9 | 1.06 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 9 | 1.06 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 9 | 1.06 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 9 | 1.06 |
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 1 | 1.06 |
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 18 | 1.06 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 16 | 1.06 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 16 | 1.06 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 16 | 1.06 |
| (1,405) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:78:LEU:HD21 | 14 | 1.06 |
| (1,405) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:78:LEU:HD22 | 14 | 1.06 |
| (1,405) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:78:LEU:HD23 | 14 | 1.06 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 1 | 1.06 |
| (1,1792) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 1 | 1.06 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 16 | 1.06 |
| (1,1405) | 1:A:8:GLN:HA | 1:A:8:GLN:HE22 | 7 | 1.06 |
| (1,1277) | 1:A:13:VAL:HA | 1:A:110:TYR:HB2 | 9 | 1.06 |
| (1,117) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 17 | 1.06 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG21 | 2 | 1.06 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG22 | 2 | 1.06 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG23 | 2 | 1.06 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:100:THR:H | 1 | 1.05 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:100:THR:H | 1 | 1.05 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:100:THR:H | 1 | 1.05 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD21 | 4 | 1.05 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD22 | 4 | 1.05 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD23 | 4 | 1.05 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD21 | 4 | 1.05 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD22 | 4 | 1.05 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD23 | 4 | 1.05 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD21 | 4 | 1.05 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD22 | 4 | 1.05 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD23 | 4 | 1.05 |
| (1,405) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:78:LEU:HD21 | 12 | 1.05 |
| (1,405) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:78:LEU:HD22 | 12 | 1.05 |
| (1,405) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:78:LEU:HD23 | 12 | 1.05 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 13 | 1.05 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 17 | 1.05 |
| (1,1959) | 1:A:85:MET:H | 1:A:86:LEU:HD21 | 12 | 1.05 |
| (1,1959) | 1:A:85:MET:H | 1:A:86:LEU:HD22 | 12 | 1.05 |
| (1,1959) | 1:A:85:MET:H | 1:A:86:LEU:HD23 | 12 | 1.05 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 11 | 1.05 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD11 | 4 | 1.05 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD12 | 4 | 1.05 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD13 | 4 | 1.05 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG21 | 11 | 1.05 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG22 | 11 | 1.05 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG23 | 11 | 1.05 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG21 | 17 | 1.05 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG22 | 17 | 1.05 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG23 | 17 | 1.05 |
| (1,1100) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HA | 6 | 1.05 |
| (1,1100) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HA | 6 | 1.05 |
| (1,1100) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HA | 6 | 1.05 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 16 | 1.04 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 16 | 1.04 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 16 | 1.04 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 18 | 1.04 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG21 | 13 | 1.04 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG22 | 13 | 1.04 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG23 | 13 | 1.04 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 7 | 1.04 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD11 | 19 | 1.04 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD12 | 19 | 1.04 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD13 | 19 | 1.04 |
| (1,1937) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:H | 4 | 1.04 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD11 | 6 | 1.04 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD12 | 6 | 1.04 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD13 | 6 | 1.04 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD11 | 6 | 1.04 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD12 | 6 | 1.04 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD13 | 6 | 1.04 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD11 | 6 | 1.04 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD12 | 6 | 1.04 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD13 | 6 | 1.04 |
| (1,1405) | 1:A:8:GLN:HA | 1:A:8:GLN:HE22 | 9 | 1.04 |
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 8 | 1.04 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG21 | 5 | 1.04 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG22 | 5 | 1.04 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG23 | 5 | 1.04 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 5 | 1.03 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 5 | 1.03 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 5 | 1.03 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD11 | 19 | 1.03 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD12 | 19 | 1.03 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD13 | 19 | 1.03 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD21 | 2 | 1.03 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD22 | 2 | 1.03 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD23 | 2 | 1.03 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD21 | 2 | 1.03 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD22 | 2 | 1.03 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD23 | 2 | 1.03 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD21 | 2 | 1.03 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD22 | 2 | 1.03 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD23 | 2 | 1.03 |
| (1,686) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:29:PRO:HB3 | 17 | 1.03 |
| (1,686) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:29:PRO:HB3 | 17 | 1.03 |
| (1,686) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:29:PRO:HB3 | 17 | 1.03 |
| (1,248) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:H | 7 | 1.03 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD11 | 6 | 1.03 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD12 | 6 | 1.03 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD13 | 6 | 1.03 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD11 | 6 | 1.03 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD12 | 6 | 1.03 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD13 | 6 | 1.03 |
| (1,1802) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:H | 1 | 1.03 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HB3 | 11 | 1.03 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HB3 | 11 | 1.03 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HB3 | 11 | 1.03 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HB3 | 11 | 1.03 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HB3 | 11 | 1.03 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HB3 | 11 | 1.03 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD11 | 2 | 1.03 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD12 | 2 | 1.03 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD13 | 2 | 1.03 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD11 | 2 | 1.03 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD12 | 2 | 1.03 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD13 | 2 | 1.03 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD11 | 2 | 1.03 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD12 | 2 | 1.03 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD13 | 2 | 1.03 |
| (1,1405) | 1:A:8:GLN:HA | 1:A:8:GLN:HE22 | 1 | 1.03 |
| (1,1405) | 1:A:8:GLN:HA | 1:A:8:GLN:HE22 | 4 | 1.03 |
| (1,1405) | 1:A:8:GLN:HA | 1:A:8:GLN:HE22 | 12 | 1.03 |
| (1,1174) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HG3 | 15 | 1.03 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,117) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 15 | 1.03 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 10 | 1.02 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 10 | 1.02 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 10 | 1.02 |
| (1,605) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:8:GLN:HE22 | 17 | 1.02 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 3 | 1.02 |
| (1,209) | 1:A:113:ALA:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 18 | 1.02 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE1 | 12 | 1.02 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE2 | 12 | 1.02 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE3 | 12 | 1.02 |
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 10 | 1.02 |
| (1,1277) | 1:A:13:VAL:HA | 1:A:110:TYR:HB2 | 13 | 1.02 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG21 | 17 | 1.02 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG22 | 17 | 1.02 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG23 | 17 | 1.02 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD21 | 14 | 1.01 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD22 | 14 | 1.01 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD23 | 14 | 1.01 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD11 | 14 | 1.01 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD12 | 14 | 1.01 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD13 | 14 | 1.01 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:81:THR:HB | 17 | 1.01 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:81:THR:HB | 17 | 1.01 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:81:THR:HB | 17 | 1.01 |
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 2 | 1.01 |
| (1,605) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:8:GLN:HE22 | 5 | 1.01 |
| (1,605) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:8:GLN:HE22 | 19 | 1.01 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB2 | 1 | 1.01 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB2 | 1 | 1.01 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB2 | 1 | 1.01 |
| (1,542) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:65:MET:HG3 | 17 | 1.01 |
| (1,542) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:65:MET:HG3 | 17 | 1.01 |
| (1,542) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:65:MET:HG3 | 17 | 1.01 |
| (1,248) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:H | 19 | 1.01 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD11 | 3 | 1.01 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD12 | 3 | 1.01 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD13 | 3 | 1.01 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD11 | 3 | 1.01 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD12 | 3 | 1.01 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD13 | 3 | 1.01 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 3 | 1.01 |
| (1,1710) | 1:A:39:ILE:H | 1:A:48:SER:HB2 | 12 | 1.01 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 13 | 1.01 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 13 | 1.01 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 13 | 1.01 |
| (1,1405) | 1:A:8:GLN:HA | 1:A:8:GLN:HE22 | 2 | 1.01 |
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 7 | 1.01 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE1 | 1:A:83:SER:HB3 | 3 | 1.01 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE2 | 1:A:83:SER:HB3 | 3 | 1.01 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE3 | 1:A:83:SER:HB3 | 3 | 1.01 |
| (1,117) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 6 | 1.01 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 12 | 1.0 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 12 | 1.0 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 12 | 1.0 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 11 | 1.0 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 11 | 1.0 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 11 | 1.0 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 11 | 1.0 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 11 | 1.0 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 11 | 1.0 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 11 | 1.0 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 11 | 1.0 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 11 | 1.0 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD21 | 11 | 1.0 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD22 | 11 | 1.0 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD23 | 11 | 1.0 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD21 | 11 | 1.0 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD22 | 11 | 1.0 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD23 | 11 | 1.0 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD21 | 11 | 1.0 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD22 | 11 | 1.0 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD23 | 11 | 1.0 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:H | 19 | 1.0 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:H | 19 | 1.0 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:H | 19 | 1.0 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD11 | 15 | 1.0 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD12 | 15 | 1.0 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD13 | 15 | 1.0 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD11 | 15 | 1.0 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD12 | 15 | 1.0 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD13 | 15 | 1.0 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD11 | 15 | 1.0 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD12 | 15 | 1.0 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD13 | 15 | 1.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD21 | 6 | 1.0 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD22 | 6 | 1.0 |
| (1,898) | 1:A:94:LEU:HB3 | 1:A:99:LEU:HD23 | 6 | 1.0 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD21 | 1:A:100:THR:H | 11 | 1.0 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD22 | 1:A:100:THR:H | 11 | 1.0 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD23 | 1:A:100:THR:H | 11 | 1.0 |
| (1,651) | 1:A:95:THR:HB | 1:A:98:GLN:HB2 | 13 | 1.0 |
| (1,1737) | 1:A:111:LYS:HD2 | 1:A:112:LEU:H | 18 | 1.0 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 17 | 1.0 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 17 | 1.0 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 17 | 1.0 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 18 | 1.0 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 18 | 1.0 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 18 | 1.0 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HD3 | 6 | 1.0 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HD3 | 6 | 1.0 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HD3 | 6 | 1.0 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD11 | 12 | 0.99 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD12 | 12 | 0.99 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD13 | 12 | 0.99 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD11 | 12 | 0.99 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD12 | 12 | 0.99 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD13 | 12 | 0.99 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD11 | 12 | 0.99 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD12 | 12 | 0.99 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD13 | 12 | 0.99 |
| (1,570) | 1:A:1:MET:HG2 | 1:A:2:VAL:HG21 | 17 | 0.99 |
| (1,570) | 1:A:1:MET:HG2 | 1:A:2:VAL:HG22 | 17 | 0.99 |
| (1,570) | 1:A:1:MET:HG2 | 1:A:2:VAL:HG23 | 17 | 0.99 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG21 | 9 | 0.99 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG22 | 9 | 0.99 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG23 | 9 | 0.99 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 14 | 0.99 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG11 | 17 | 0.99 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG12 | 17 | 0.99 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG13 | 17 | 0.99 |
| (1,1843) | 1:A:23:THR:H | 1:A:74:GLN:HE21 | 12 | 0.99 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE1 | 6 | 0.99 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE2 | 6 | 0.99 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE3 | 6 | 0.99 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 6 | 0.99 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 6 | 0.99 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 6 | 0.99 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG21 | 9 | 0.99 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG22 | 9 | 0.99 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG23 | 9 | 0.99 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB1 | 2 | 0.99 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB2 | 2 | 0.99 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB3 | 2 | 0.99 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 19 | 0.98 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 19 | 0.98 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 19 | 0.98 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 7 | 0.98 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 7 | 0.98 |
| (1,822) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 7 | 0.98 |
| (1,63) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 11 | 0.98 |
| (1,63) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 11 | 0.98 |
| (1,608) | 1:A:98:GLN:HA | 1:A:111:LYS:HD2 | 12 | 0.98 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB3 | 7 | 0.98 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB3 | 7 | 0.98 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB3 | 7 | 0.98 |
| (1,248) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:H | 18 | 0.98 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB2 | 1:A:75:LEU:HB3 | 2 | 0.98 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB3 | 1:A:75:LEU:HB3 | 2 | 0.98 |
| (1,2016) | 1:A:106:GLN:HE22 | 1:A:107:THR:H | 12 | 0.98 |
| (1,1937) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:H | 15 | 0.98 |
| (1,1280) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:101:LEU:HD21 | 13 | 0.98 |
| (1,1280) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:101:LEU:HD22 | 13 | 0.98 |
| (1,1280) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:101:LEU:HD23 | 13 | 0.98 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG21 | 1 | 0.98 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG22 | 1 | 0.98 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG23 | 1 | 0.98 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG21 | 16 | 0.98 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG22 | 16 | 0.98 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG23 | 16 | 0.98 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG21 | 13 | 0.98 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG22 | 13 | 0.98 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG23 | 13 | 0.98 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 19 | 0.97 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 19 | 0.97 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 19 | 0.97 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD21 | 17 | 0.97 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD22 | 17 | 0.97 |
| (1,797) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:78:LEU:HD23 | 17 | 0.97 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 4 | 0.97 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 4 | 0.97 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 4 | 0.97 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD21 | 4 | 0.97 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD22 | 4 | 0.97 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD23 | 4 | 0.97 |
| (1,63) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 19 | 0.97 |
| (1,63) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 19 | 0.97 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.97 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.97 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.97 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HB2 | 13 | 0.97 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HB2 | 13 | 0.97 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HB2 | 13 | 0.97 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 11 | 0.97 |
| (1,311) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:111:LYS:H | 18 | 0.97 |
| (1,311) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:111:LYS:H | 19 | 0.97 |
| (1,277) | 1:A:44:CYS:HB2 | 1:A:45:ASN:HD22 | 6 | 0.97 |
| (1,2016) | 1:A:106:GLN:HE22 | 1:A:107:THR:H | 14 | 0.97 |
| (1,1917) | 1:A:24:SER:HB2 | 1:A:26:LYS:H | 9 | 0.97 |
| (1,1782) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:H | 14 | 0.97 |
| (1,1782) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:H | 14 | 0.97 |
| (1,1782) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:H | 14 | 0.97 |
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 4 | 0.97 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD21 | 7 | 0.97 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD22 | 7 | 0.97 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD23 | 7 | 0.97 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD21 | 7 | 0.97 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD22 | 7 | 0.97 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD23 | 7 | 0.97 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD21 | 7 | 0.97 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD22 | 7 | 0.97 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD23 | 7 | 0.97 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB1 | 7 | 0.97 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB2 | 7 | 0.97 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB3 | 7 | 0.97 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB1 | 7 | 0.97 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB2 | 7 | 0.97 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB3 | 7 | 0.97 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB1 | 7 | 0.97 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB2 | 7 | 0.97 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB3 | 7 | 0.97 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1095) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:H | 17 | 0.97 |
| (1,1095) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:H | 17 | 0.97 |
| (1,1095) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:H | 17 | 0.97 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 19 | 0.96 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 19 | 0.96 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 19 | 0.96 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 19 | 0.96 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 19 | 0.96 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 19 | 0.96 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 12 | 0.96 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 12 | 0.96 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 12 | 0.96 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 0.96 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 0.96 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 0.96 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 0.96 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 0.96 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 0.96 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 0.96 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 0.96 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 0.96 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 0.96 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 0.96 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 0.96 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 0.96 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 0.96 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 0.96 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 0.96 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 0.96 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 0.96 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD21 | 6 | 0.96 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD22 | 6 | 0.96 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD23 | 6 | 0.96 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD21 | 7 | 0.96 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD22 | 7 | 0.96 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD23 | 7 | 0.96 |
| (1,688) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:29:PRO:HB2 | 14 | 0.96 |
| (1,688) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:29:PRO:HB2 | 14 | 0.96 |
| (1,688) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:29:PRO:HB2 | 14 | 0.96 |
| (1,651) | 1:A:95:THR:HB | 1:A:98:GLN:HB2 | 7 | 0.96 |
| (1,651) | 1:A:95:THR:HB | 1:A:98:GLN:HB2 | 19 | 0.96 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 8 | 0.96 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,117) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 8 | 0.96 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 8 | 0.95 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 8 | 0.95 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 8 | 0.95 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 14 | 0.95 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 14 | 0.95 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 14 | 0.95 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:100:THR:H | 7 | 0.95 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:100:THR:H | 7 | 0.95 |
| (1,945) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:100:THR:H | 7 | 0.95 |
| (1,930) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:22:VAL:H | 8 | 0.95 |
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 7 | 0.95 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 10 | 0.95 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 10 | 0.95 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 10 | 0.95 |
| (1,248) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:H | 1 | 0.95 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 19 | 0.95 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD22 | 19 | 0.95 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD23 | 19 | 0.95 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 19 | 0.95 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 19 | 0.95 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 19 | 0.95 |
| (1,2130) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:7:LEU:HG | 11 | 0.95 |
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 3 | 0.95 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 11 | 0.95 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 11 | 0.95 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 11 | 0.95 |
| (1,1103) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:109:THR:HB | 3 | 0.95 |
| (1,1103) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:109:THR:HB | 3 | 0.95 |
| (1,1103) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:109:THR:HB | 3 | 0.95 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 4 | 0.94 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 4 | 0.94 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 4 | 0.94 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 4 | 0.94 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 4 | 0.94 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 4 | 0.94 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:H | 12 | 0.94 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:H | 12 | 0.94 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:H | 12 | 0.94 |
| (1,880) | 1:A:98:GLN:HA | 1:A:111:LYS:HG3 | 11 | 0.94 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD21 | 6 | 0.94 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD22 | 6 | 0.94 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD23 | 6 | 0.94 |
| (1,692) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:29:PRO:HA | 17 | 0.94 |
| (1,692) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:29:PRO:HA | 17 | 0.94 |
| (1,692) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:29:PRO:HA | 17 | 0.94 |
| (1,561) | 1:A:45:ASN:HA | 1:A:46:ARG:HB3 | 2 | 0.94 |
| (1,561) | 1:A:45:ASN:HA | 1:A:46:ARG:HB3 | 11 | 0.94 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD21 | 11 | 0.94 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD22 | 11 | 0.94 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD23 | 11 | 0.94 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG21 | 6 | 0.94 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG22 | 6 | 0.94 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG23 | 6 | 0.94 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD11 | 6 | 0.94 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD12 | 6 | 0.94 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD13 | 6 | 0.94 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD11 | 1 | 0.94 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD12 | 1 | 0.94 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD13 | 1 | 0.94 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD11 | 1 | 0.94 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD12 | 1 | 0.94 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD13 | 1 | 0.94 |
| (1,1843) | 1:A:23:THR:H | 1:A:74:GLN:HE21 | 15 | 0.94 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 9 | 0.94 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 9 | 0.94 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 9 | 0.94 |
| (1,155) | 1:A:36:LYS:HB2 | 1:A:36:LYS:HE2 | 12 | 0.94 |
| (1,1405) | 1:A:8:GLN:HA | 1:A:8:GLN:HE22 | 6 | 0.94 |
| (1,1405) | 1:A:8:GLN:HA | 1:A:8:GLN:HE22 | 8 | 0.94 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 3 | 0.94 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 3 | 0.94 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 3 | 0.94 |
| (1,104) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HG3 | 10 | 0.94 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 17 | 0.93 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 17 | 0.93 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 17 | 0.93 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 3 | 0.93 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 3 | 0.93 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 3 | 0.93 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 3 | 0.93 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 3 | 0.93 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 3 | 0.93 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 0.93 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 0.93 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 0.93 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 0.93 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 0.93 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 0.93 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 0.93 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 0.93 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 0.93 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 0.93 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 0.93 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 0.93 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 0.93 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 0.93 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 0.93 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 0.93 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 0.93 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 0.93 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:99:LEU:H | 18 | 0.93 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:99:LEU:H | 18 | 0.93 |
| (1,946) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:99:LEU:H | 18 | 0.93 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 7 | 0.93 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 7 | 0.93 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 7 | 0.93 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD11 | 14 | 0.93 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD12 | 14 | 0.93 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD13 | 14 | 0.93 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 14 | 0.93 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 14 | 0.93 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 14 | 0.93 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD21 | 1:A:100:THR:H | 13 | 0.93 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD22 | 1:A:100:THR:H | 13 | 0.93 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD23 | 1:A:100:THR:H | 13 | 0.93 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:81:THR:HB | 14 | 0.93 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:81:THR:HB | 14 | 0.93 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:81:THR:HB | 14 | 0.93 |
| (1,587) | 1:A:36:LYS:HB2 | 1:A:38:MET:HG2 | 11 | 0.93 |
| (1,456) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:68:MET:HB2 | 17 | 0.93 |
| (1,311) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:111:LYS:H | 14 | 0.93 |
| (1,2200) | 1:A:101:LEU:HD21 | 1:A:110:TYR:HE1 | 7 | 0.93 |
| (1,2200) | 1:A:101:LEU:HD21 | 1:A:110:TYR:HE2 | 7 | 0.93 |
| (1,2200) | 1:A:101:LEU:HD22 | 1:A:110:TYR:HE1 | 7 | 0.93 |
| (1,2200) | 1:A:101:LEU:HD22 | 1:A:110:TYR:HE2 | 7 | 0.93 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2200) | 1:A:101:LEU:HD23 | 1:A:110:TYR:HE1 | 7 | 0.93 |
| (1,2200) | 1:A:101:LEU:HD23 | 1:A:110:TYR:HE2 | 7 | 0.93 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 5 | 0.93 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD22 | 5 | 0.93 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD23 | 5 | 0.93 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 5 | 0.93 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 5 | 0.93 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 5 | 0.93 |
| (1,1940) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HG3 | 6 | 0.93 |
| (1,1560) | 1:A:69:MET:HA | 1:A:70:CYS:HB3 | 12 | 0.93 |
| (1,1405) | 1:A:8:GLN:HA | 1:A:8:GLN:HE22 | 11 | 0.93 |
| (1,1280) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:101:LEU:HD21 | 3 | 0.93 |
| (1,1280) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:101:LEU:HD22 | 3 | 0.93 |
| (1,1280) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:101:LEU:HD23 | 3 | 0.93 |
| (1,1098) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:16:SER:H | 17 | 0.93 |
| (1,1098) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:16:SER:H | 17 | 0.93 |
| (1,1098) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:16:SER:H | 17 | 0.93 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 9 | 0.92 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 9 | 0.92 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 9 | 0.92 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 1 | 0.92 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 1 | 0.92 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 1 | 0.92 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 18 | 0.92 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 18 | 0.92 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 18 | 0.92 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 18 | 0.92 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 18 | 0.92 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 18 | 0.92 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 18 | 0.92 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 18 | 0.92 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 18 | 0.92 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD21 | 18 | 0.92 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD22 | 18 | 0.92 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD23 | 18 | 0.92 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD21 | 18 | 0.92 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD22 | 18 | 0.92 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD23 | 18 | 0.92 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD21 | 18 | 0.92 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD22 | 18 | 0.92 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD23 | 18 | 0.92 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 11 | 0.92 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 11 | 0.92 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 11 | 0.92 |
| (1,747) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HG | 18 | 0.92 |
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 16 | 0.92 |
| (1,607) | 1:A:8:GLN:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 11 | 0.92 |
| (1,561) | 1:A:45:ASN:HA | 1:A:46:ARG:HB3 | 4 | 0.92 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD11 | 2 | 0.92 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD12 | 2 | 0.92 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD13 | 2 | 0.92 |
| (1,2130) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:7:LEU:HG | 14 | 0.92 |
| (1,1792) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 12 | 0.92 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 6 | 0.92 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 0.92 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 0.92 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 0.92 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 10 | 0.92 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 10 | 0.92 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 10 | 0.92 |
| (1,1560) | 1:A:69:MET:HA | 1:A:70:CYS:HB3 | 8 | 0.92 |
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 17 | 0.92 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE1 | 1:A:83:SER:HB3 | 15 | 0.92 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE2 | 1:A:83:SER:HB3 | 15 | 0.92 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE3 | 1:A:83:SER:HB3 | 15 | 0.92 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE1 | 19 | 0.92 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE2 | 19 | 0.92 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE3 | 19 | 0.92 |
| (1,1277) | 1:A:13:VAL:HA | 1:A:110:TYR:HB2 | 7 | 0.92 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE22 | 15 | 0.92 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE22 | 15 | 0.92 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE22 | 15 | 0.92 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE22 | 18 | 0.92 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE22 | 18 | 0.92 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE22 | 18 | 0.92 |
| (1,117) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 3 | 0.92 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:31:ILE:H | 7 | 0.92 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:31:ILE:H | 7 | 0.92 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:31:ILE:H | 7 | 0.92 |
| (1,1096) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:15:GLU:H | 14 | 0.92 |
| (1,1096) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:15:GLU:H | 14 | 0.92 |
| (1,1096) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:15:GLU:H | 14 | 0.92 |
| (1,1085) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HD21 | 5 | 0.92 |
| (1,1085) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HD22 | 5 | 0.92 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1085) | 1:A:75:LEU:HA | 1:A:75:LEU:HD23 | 5 | 0.92 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD11 | 7 | 0.91 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD12 | 7 | 0.91 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD13 | 7 | 0.91 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD11 | 7 | 0.91 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD12 | 7 | 0.91 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD13 | 7 | 0.91 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD11 | 7 | 0.91 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD12 | 7 | 0.91 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD13 | 7 | 0.91 |
| (1,300) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 8 | 0.91 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 15 | 0.91 |
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 2 | 0.91 |
| (1,1560) | 1:A:69:MET:HA | 1:A:70:CYS:HB3 | 11 | 0.91 |
| (1,1405) | 1:A:8:GLN:HA | 1:A:8:GLN:HE22 | 3 | 0.91 |
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 14 | 0.91 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD11 | 7 | 0.9 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD12 | 7 | 0.9 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD13 | 7 | 0.9 |
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 8 | 0.9 |
| (1,590) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:105:LYS:HE2 | 3 | 0.9 |
| (1,590) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:105:LYS:HE3 | 3 | 0.9 |
| (1,561) | 1:A:45:ASN:HA | 1:A:46:ARG:HB3 | 3 | 0.9 |
| (1,248) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:H | 4 | 0.9 |
| (1,2130) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:7:LEU:HG | 4 | 0.9 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HB3 | 14 | 0.9 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HB3 | 14 | 0.9 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HB3 | 14 | 0.9 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HB3 | 14 | 0.9 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HB3 | 14 | 0.9 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HB3 | 14 | 0.9 |
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 8 | 0.9 |
| (1,1405) | 1:A:8:GLN:HA | 1:A:8:GLN:HE22 | 14 | 0.9 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE22 | 2 | 0.9 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE22 | 2 | 0.9 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE22 | 2 | 0.9 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE22 | 5 | 0.9 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE22 | 5 | 0.9 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE22 | 5 | 0.9 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE22 | 11 | 0.9 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE22 | 11 | 0.9 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE22 | 11 | 0.9 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE22 | 13 | 0.9 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE22 | 13 | 0.9 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE22 | 13 | 0.9 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:31:ILE:H | 16 | 0.9 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:31:ILE:H | 16 | 0.9 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:31:ILE:H | 16 | 0.9 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 13 | 0.89 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 13 | 0.89 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 13 | 0.89 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 13 | 0.89 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 13 | 0.89 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 13 | 0.89 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 13 | 0.89 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 13 | 0.89 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 13 | 0.89 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD21 | 13 | 0.89 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD22 | 13 | 0.89 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD23 | 13 | 0.89 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD21 | 13 | 0.89 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD22 | 13 | 0.89 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD23 | 13 | 0.89 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD21 | 13 | 0.89 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD22 | 13 | 0.89 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD23 | 13 | 0.89 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD21 | 1:A:100:THR:H | 17 | 0.89 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD22 | 1:A:100:THR:H | 17 | 0.89 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD23 | 1:A:100:THR:H | 17 | 0.89 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 7 | 0.89 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 7 | 0.89 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 7 | 0.89 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 10 | 0.89 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD22 | 10 | 0.89 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD23 | 10 | 0.89 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 10 | 0.89 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 10 | 0.89 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 10 | 0.89 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE22 | 1 | 0.89 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE22 | 1 | 0.89 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE22 | 1 | 0.89 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE22 | 8 | 0.89 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE22 | 8 | 0.89 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE22 | 8 | 0.89 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE22 | 14 | 0.89 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE22 | 14 | 0.89 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE22 | 14 | 0.89 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 17 | 0.88 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 17 | 0.88 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 17 | 0.88 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD11 | 9 | 0.88 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD12 | 9 | 0.88 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD13 | 9 | 0.88 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:81:THR:HB | 9 | 0.88 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:81:THR:HB | 9 | 0.88 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:81:THR:HB | 9 | 0.88 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:81:THR:HB | 11 | 0.88 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:81:THR:HB | 11 | 0.88 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:81:THR:HB | 11 | 0.88 |
| (1,561) | 1:A:45:ASN:HA | 1:A:46:ARG:HB3 | 8 | 0.88 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB3 | 16 | 0.88 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB3 | 16 | 0.88 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB3 | 16 | 0.88 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 4 | 0.88 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 4 | 0.88 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 4 | 0.88 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 9 | 0.88 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 9 | 0.88 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 9 | 0.88 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 16 | 0.88 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 16 | 0.88 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 16 | 0.88 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 13 | 0.88 |
| (1,1560) | 1:A:69:MET:HA | 1:A:70:CYS:HB3 | 16 | 0.88 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 15 | 0.88 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 15 | 0.88 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 15 | 0.88 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:51:GLY:HA2 | 5 | 0.88 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:51:GLY:HA2 | 5 | 0.88 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:51:GLY:HA2 | 5 | 0.88 |
| (1,1089) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HG21 | 6 | 0.88 |
| (1,1089) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HG22 | 6 | 0.88 |
| (1,1089) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HG23 | 6 | 0.88 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 10 | 0.87 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 10 | 0.87 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 10 | 0.87 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 19 | 0.87 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 19 | 0.87 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 19 | 0.87 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 13 | 0.87 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 13 | 0.87 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 13 | 0.87 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 13 | 0.87 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 13 | 0.87 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 13 | 0.87 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD11 | 4 | 0.87 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD12 | 4 | 0.87 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD13 | 4 | 0.87 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 14 | 0.87 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD12 | 14 | 0.87 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD13 | 14 | 0.87 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD21 | 4 | 0.87 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD22 | 4 | 0.87 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD23 | 4 | 0.87 |
| (1,660) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HB | 6 | 0.87 |
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 17 | 0.87 |
| (1,607) | 1:A:8:GLN:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 16 | 0.87 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HB3 | 12 | 0.87 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HB3 | 12 | 0.87 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HB3 | 12 | 0.87 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HB3 | 12 | 0.87 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HB3 | 12 | 0.87 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HB3 | 12 | 0.87 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 11 | 0.87 |
| (1,1405) | 1:A:8:GLN:HA | 1:A:8:GLN:HE22 | 15 | 0.87 |
| (1,1277) | 1:A:13:VAL:HA | 1:A:110:TYR:HB2 | 16 | 0.87 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 4 | 0.87 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 4 | 0.87 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 4 | 0.87 |
| (1,1100) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HA | 14 | 0.87 |
| (1,1100) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HA | 14 | 0.87 |
| (1,1100) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HA | 14 | 0.87 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG21 | 5 | 0.87 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG22 | 5 | 0.87 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG23 | 5 | 0.87 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 17 | 0.86 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 17 | 0.86 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 17 | 0.86 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 17 | 0.86 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 17 | 0.86 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 17 | 0.86 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD11 | 9 | 0.86 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD12 | 9 | 0.86 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD13 | 9 | 0.86 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD11 | 11 | 0.86 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD12 | 11 | 0.86 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD13 | 11 | 0.86 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD11 | 12 | 0.86 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD12 | 12 | 0.86 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD13 | 12 | 0.86 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD11 | 14 | 0.86 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD12 | 14 | 0.86 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD13 | 14 | 0.86 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD21 | 11 | 0.86 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD22 | 11 | 0.86 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD23 | 11 | 0.86 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD21 | 1:A:100:THR:H | 19 | 0.86 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD22 | 1:A:100:THR:H | 19 | 0.86 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD23 | 1:A:100:THR:H | 19 | 0.86 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD21 | 1:A:109:THR:H | 3 | 0.86 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD22 | 1:A:109:THR:H | 3 | 0.86 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD23 | 1:A:109:THR:H | 3 | 0.86 |
| (1,617) | 1:A:31:ILE:HG12 | 1:A:41:GLY:HA2 | 12 | 0.86 |
| (1,456) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:68:MET:HB2 | 4 | 0.86 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG21 | 11 | 0.86 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG22 | 11 | 0.86 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG23 | 11 | 0.86 |
| (1,248) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:H | 5 | 0.86 |
| (1,2006) | 1:A:28:PRO:HB3 | 1:A:30:GLU:H | 10 | 0.86 |
| (1,1940) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HG3 | 2 | 0.86 |
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 11 | 0.86 |
| (1,1560) | 1:A:69:MET:HA | 1:A:70:CYS:HB3 | 18 | 0.86 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD11 | 8 | 0.86 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD12 | 8 | 0.86 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD13 | 8 | 0.86 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD11 | 8 | 0.86 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD12 | 8 | 0.86 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD13 | 8 | 0.86 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD11 | 8 | 0.86 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD12 | 8 | 0.86 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD13 | 8 | 0.86 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE1 | 1:A:83:SER:HB3 | 4 | 0.86 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE2 | 1:A:83:SER:HB3 | 4 | 0.86 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE3 | 1:A:83:SER:HB3 | 4 | 0.86 |
| (1,1259) | 1:A:39:ILE:HA | 1:A:40:SER:HB3 | 2 | 0.86 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB1 | 17 | 0.86 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB2 | 17 | 0.86 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB3 | 17 | 0.86 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB1 | 17 | 0.86 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB2 | 17 | 0.86 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB3 | 17 | 0.86 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB1 | 17 | 0.86 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB2 | 17 | 0.86 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB3 | 17 | 0.86 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG21 | 6 | 0.86 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG22 | 6 | 0.86 |
| (1,1165) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:13:VAL:HG23 | 6 | 0.86 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:31:ILE:H | 10 | 0.86 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:31:ILE:H | 10 | 0.86 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:31:ILE:H | 10 | 0.86 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB1 | 1:A:86:LEU:HB2 | 18 | 0.86 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HB2 | 18 | 0.86 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB3 | 1:A:86:LEU:HB2 | 18 | 0.86 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 9 | 0.85 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 9 | 0.85 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 9 | 0.85 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 18 | 0.85 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 18 | 0.85 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 18 | 0.85 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 18 | 0.85 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 18 | 0.85 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 18 | 0.85 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD21 | 9 | 0.85 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD22 | 9 | 0.85 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD23 | 9 | 0.85 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD11 | 6 | 0.85 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD12 | 6 | 0.85 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD13 | 6 | 0.85 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 6 | 0.85 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 6 | 0.85 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 6 | 0.85 |
| (1,880) | 1:A:98:GLN:HA | 1:A:111:LYS:HG3 | 5 | 0.85 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,588) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:85:MET:H | 14 | 0.85 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 0.85 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 0.85 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 0.85 |
| (1,311) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:111:LYS:H | 17 | 0.85 |
| (1,248) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:H | 13 | 0.85 |
| (1,2091) | 1:A:91:GLN:HE22 | 1:A:103:THR:HA | 3 | 0.85 |
| (1,2016) | 1:A:106:GLN:HE22 | 1:A:107:THR:H | 1 | 0.85 |
| (1,1560) | 1:A:69:MET:HA | 1:A:70:CYS:HB3 | 5 | 0.85 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 10 | 0.85 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 10 | 0.85 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 10 | 0.85 |
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 3 | 0.85 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 14 | 0.85 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 14 | 0.85 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 14 | 0.85 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 7 | 0.85 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB1 | 10 | 0.85 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB2 | 10 | 0.85 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB3 | 10 | 0.85 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 15 | 0.84 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 15 | 0.84 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 15 | 0.84 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 15 | 0.84 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 15 | 0.84 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 15 | 0.84 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD21 | 13 | 0.84 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD22 | 13 | 0.84 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD23 | 13 | 0.84 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD21 | 19 | 0.84 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD22 | 19 | 0.84 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD23 | 19 | 0.84 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD21 | 1:A:100:THR:H | 9 | 0.84 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD22 | 1:A:100:THR:H | 9 | 0.84 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD23 | 1:A:100:THR:H | 9 | 0.84 |
| (1,617) | 1:A:31:ILE:HG12 | 1:A:41:GLY:HA2 | 4 | 0.84 |
| (1,567) | 1:A:1:MET:HG2 | 1:A:3:THR:HA | 4 | 0.84 |
| (1,551) | 1:A:34:GLY:H | 1:A:38:MET:HB2 | 7 | 0.84 |
| (1,472) | 1:A:26:LYS:HB2 | 1:A:27:ASN:HD21 | 7 | 0.84 |
| (1,248) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:H | 12 | 0.84 |
| (1,2158) | 1:A:48:SER:HB2 | 1:A:49:GLY:H | 2 | 0.84 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 11 | 0.84 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 11 | 0.84 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 11 | 0.84 |
| (1,2016) | 1:A:106:GLN:HE22 | 1:A:107:THR:H | 16 | 0.84 |
| (1,165) | 1:A:45:ASN:HB2 | 1:A:67:ARG:HA | 4 | 0.84 |
| (1,1405) | 1:A:8:GLN:HA | 1:A:8:GLN:HE22 | 13 | 0.84 |
| (1,1405) | 1:A:8:GLN:HA | 1:A:8:GLN:HE22 | 16 | 0.84 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE22 | 3 | 0.84 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE22 | 3 | 0.84 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE22 | 3 | 0.84 |
| (1,117) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 1 | 0.84 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB1 | 8 | 0.84 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB2 | 8 | 0.84 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB3 | 8 | 0.84 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:31:ILE:H | 1 | 0.84 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:31:ILE:H | 1 | 0.84 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:31:ILE:H | 1 | 0.84 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 4 | 0.83 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 4 | 0.83 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 4 | 0.83 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 12 | 0.83 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 12 | 0.83 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 12 | 0.83 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 15 | 0.83 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 15 | 0.83 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 15 | 0.83 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD21 | 1:A:109:THR:H | 6 | 0.83 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD22 | 1:A:109:THR:H | 6 | 0.83 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD23 | 1:A:109:THR:H | 6 | 0.83 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD21 | 7 | 0.83 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD22 | 7 | 0.83 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD23 | 7 | 0.83 |
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 5 | 0.83 |
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 11 | 0.83 |
| (1,561) | 1:A:45:ASN:HA | 1:A:46:ARG:HB3 | 12 | 0.83 |
| (1,425) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:17:VAL:HB | 6 | 0.83 |
| (1,425) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:17:VAL:HB | 6 | 0.83 |
| (1,425) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:17:VAL:HB | 6 | 0.83 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 1 | 0.83 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD21 | 11 | 0.83 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD22 | 11 | 0.83 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD23 | 11 | 0.83 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 11 | 0.83 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 11 | 0.83 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 11 | 0.83 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 11 | 0.83 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 11 | 0.83 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 11 | 0.83 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE1 | 3 | 0.83 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE2 | 3 | 0.83 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE3 | 3 | 0.83 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 16 | 0.83 |
| (1,1259) | 1:A:39:ILE:HA | 1:A:40:SER:HB3 | 16 | 0.83 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 15 | 0.82 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 15 | 0.82 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 15 | 0.82 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 2 | 0.82 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 2 | 0.82 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 2 | 0.82 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 7 | 0.82 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 7 | 0.82 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 7 | 0.82 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 6 | 0.82 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 6 | 0.82 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 6 | 0.82 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 6 | 0.82 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 6 | 0.82 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 6 | 0.82 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 8 | 0.82 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 8 | 0.82 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 8 | 0.82 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 8 | 0.82 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 8 | 0.82 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 8 | 0.82 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD11 | 8 | 0.82 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD12 | 8 | 0.82 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD13 | 8 | 0.82 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD21 | 1:A:100:THR:H | 14 | 0.82 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD22 | 1:A:100:THR:H | 14 | 0.82 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD23 | 1:A:100:THR:H | 14 | 0.82 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 6 | 0.82 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 6 | 0.82 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 6 | 0.82 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD21 | 12 | 0.82 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD22 | 12 | 0.82 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD23 | 12 | 0.82 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD21 | 13 | 0.82 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD22 | 13 | 0.82 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD23 | 13 | 0.82 |
| (1,472) | 1:A:26:LYS:HB2 | 1:A:27:ASN:HD21 | 6 | 0.82 |
| (1,458) | 1:A:69:MET:H | 1:A:69:MET:HB2 | 15 | 0.82 |
| (1,286) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:57:GLU:HB2 | 6 | 0.82 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB2 | 1:A:75:LEU:HB3 | 9 | 0.82 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB3 | 1:A:75:LEU:HB3 | 9 | 0.82 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HB3 | 13 | 0.82 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HB3 | 13 | 0.82 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HB3 | 13 | 0.82 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HB3 | 13 | 0.82 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HB3 | 13 | 0.82 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HB3 | 13 | 0.82 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 2 | 0.82 |
| (1,1188) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:84:GLU:HB2 | 4 | 0.82 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 18 | 0.81 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 18 | 0.81 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 18 | 0.81 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 0.81 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 0.81 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 0.81 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 0.81 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 0.81 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 0.81 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 0.81 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 0.81 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 0.81 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 0.81 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 0.81 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 0.81 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 0.81 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 0.81 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 0.81 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 0.81 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 0.81 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 0.81 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 9 | 0.81 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 9 | 0.81 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 9 | 0.81 |
| (1,458) | 1:A:69:MET:H | 1:A:69:MET:HB2 | 6 | 0.81 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HB2 | 17 | 0.81 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HB2 | 17 | 0.81 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HB2 | 17 | 0.81 |
| (1,248) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:H | 14 | 0.81 |
| (1,1782) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:H | 12 | 0.81 |
| (1,1782) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:H | 12 | 0.81 |
| (1,1782) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:H | 12 | 0.81 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 5 | 0.81 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 5 | 0.81 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 5 | 0.81 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 16 | 0.81 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 16 | 0.81 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 16 | 0.81 |
| (1,1277) | 1:A:13:VAL:HA | 1:A:110:TYR:HB2 | 1 | 0.81 |
| (1,1277) | 1:A:13:VAL:HA | 1:A:110:TYR:HB2 | 5 | 0.81 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB1 | 10 | 0.81 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB2 | 10 | 0.81 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB3 | 10 | 0.81 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB1 | 10 | 0.81 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB2 | 10 | 0.81 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB3 | 10 | 0.81 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB1 | 10 | 0.81 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB2 | 10 | 0.81 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB3 | 10 | 0.81 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:H | 10 | 0.81 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:H | 10 | 0.81 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:H | 10 | 0.81 |
| (1,1097) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:109:THR:H | 14 | 0.81 |
| (1,1097) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:109:THR:H | 14 | 0.81 |
| (1,1097) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:109:THR:H | 14 | 0.81 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:6:GLN:HE21 | 16 | 0.81 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:6:GLN:HE21 | 16 | 0.81 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:6:GLN:HE21 | 16 | 0.81 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 2 | 0.8 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 2 | 0.8 |
| (1,997) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 2 | 0.8 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD11 | 1:A:116:MET:H | 17 | 0.8 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD12 | 1:A:116:MET:H | 17 | 0.8 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD13 | 1:A:116:MET:H | 17 | 0.8 |
| (1,824) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:101:LEU:HD21 | 13 | 0.8 |
| (1,824) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:101:LEU:HD22 | 13 | 0.8 |
| (1,824) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:101:LEU:HD23 | 13 | 0.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 19 | 0.8 |
| (1,561) | 1:A:45:ASN:HA | 1:A:46:ARG:HB3 | 5 | 0.8 |
| (1,472) | 1:A:26:LYS:HB2 | 1:A:27:ASN:HD21 | 15 | 0.8 |
| (1,456) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:68:MET:HB2 | 10 | 0.8 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HB3 | 19 | 0.8 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HB3 | 19 | 0.8 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HB3 | 19 | 0.8 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG3 | 6 | 0.8 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG3 | 6 | 0.8 |
| (1,395) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG3 | 6 | 0.8 |
| (1,2198) | 1:A:9:HIS:HB3 | 1:A:9:HIS:HD2 | 16 | 0.8 |
| (1,1918) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HB3 | 13 | 0.8 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 16 | 0.8 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HB3 | 6 | 0.8 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HB3 | 6 | 0.8 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HB3 | 6 | 0.8 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HB3 | 6 | 0.8 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HB3 | 6 | 0.8 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HB3 | 6 | 0.8 |
| (1,1405) | 1:A:8:GLN:HA | 1:A:8:GLN:HE22 | 18 | 0.8 |
| (1,1259) | 1:A:39:ILE:HA | 1:A:40:SER:HB3 | 11 | 0.8 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 14 | 0.8 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 14 | 0.8 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 14 | 0.8 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 15 | 0.79 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 15 | 0.79 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 15 | 0.79 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 6 | 0.79 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 6 | 0.79 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 6 | 0.79 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 6 | 0.79 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 6 | 0.79 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 6 | 0.79 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 7 | 0.79 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 7 | 0.79 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 7 | 0.79 |
| (1,458) | 1:A:69:MET:H | 1:A:69:MET:HB2 | 13 | 0.79 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HB2 | 5 | 0.79 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HB2 | 5 | 0.79 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HB2 | 5 | 0.79 |
| (1,361) | 1:A:12:PHE:HA | 1:A:111:LYS:HB2 | 8 | 0.79 |
| (1,2130) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:7:LEU:HG | 12 | 0.79 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 4 | 0.79 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 4 | 0.79 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 4 | 0.79 |
| (1,1802) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:H | 6 | 0.79 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 19 | 0.79 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 5 | 0.79 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 7 | 0.79 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 7 | 0.79 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 7 | 0.79 |
| (1,1560) | 1:A:69:MET:HA | 1:A:70:CYS:HB3 | 13 | 0.79 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE1 | 15 | 0.79 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE2 | 15 | 0.79 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE3 | 15 | 0.79 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB1 | 11 | 0.79 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB2 | 11 | 0.79 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB3 | 11 | 0.79 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB1 | 11 | 0.79 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB2 | 11 | 0.79 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB3 | 11 | 0.79 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB1 | 11 | 0.79 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB2 | 11 | 0.79 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB3 | 11 | 0.79 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG21 | 10 | 0.79 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG22 | 10 | 0.79 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG23 | 10 | 0.79 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 3 | 0.78 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 3 | 0.78 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 3 | 0.78 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD21 | 1:A:100:THR:H | 5 | 0.78 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD22 | 1:A:100:THR:H | 5 | 0.78 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD23 | 1:A:100:THR:H | 5 | 0.78 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD21 | 1:A:109:THR:H | 12 | 0.78 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD22 | 1:A:109:THR:H | 12 | 0.78 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD23 | 1:A:109:THR:H | 12 | 0.78 |
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 13 | 0.78 |
| (1,617) | 1:A:31:ILE:HG12 | 1:A:41:GLY:HA2 | 9 | 0.78 |
| (1,588) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:85:MET:H | 16 | 0.78 |
| (1,561) | 1:A:45:ASN:HA | 1:A:46:ARG:HB3 | 10 | 0.78 |
| (1,561) | 1:A:45:ASN:HA | 1:A:46:ARG:HB3 | 16 | 0.78 |
| (1,345) | 1:A:84:GLU:HG2 | 1:A:85:MET:H | 8 | 0.78 |
| (1,2141) | 1:A:106:GLN:HE21 | 1:A:108:LEU:HD21 | 8 | 0.78 |
| (1,2141) | 1:A:106:GLN:HE21 | 1:A:108:LEU:HD22 | 8 | 0.78 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2141) | 1:A:106:GLN:HE21 | 1:A:108:LEU:HD23 | 8 | 0.78 |
| (1,2068) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:106:GLN:HB3 | 6 | 0.78 |
| (1,1976) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ASN:H | 12 | 0.78 |
| (1,1918) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HB3 | 6 | 0.78 |
| (1,1918) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HB3 | 12 | 0.78 |
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 7 | 0.78 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 11 | 0.78 |
| (1,1560) | 1:A:69:MET:HA | 1:A:70:CYS:HB3 | 9 | 0.78 |
| (1,1560) | 1:A:69:MET:HA | 1:A:70:CYS:HB3 | 17 | 0.78 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB1 | 1:A:86:LEU:HB2 | 11 | 0.78 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HB2 | 11 | 0.78 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB3 | 1:A:86:LEU:HB2 | 11 | 0.78 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 10 | 0.78 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 10 | 0.78 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 10 | 0.78 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 1 | 0.77 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 1 | 0.77 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 1 | 0.77 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 4 | 0.77 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 4 | 0.77 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 4 | 0.77 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 5 | 0.77 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 5 | 0.77 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 5 | 0.77 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 17 | 0.77 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 17 | 0.77 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 17 | 0.77 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 7 | 0.77 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 7 | 0.77 |
| (1,979) | 1:A:10:HIS:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 7 | 0.77 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 8 | 0.77 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 8 | 0.77 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 8 | 0.77 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD11 | 17 | 0.77 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD12 | 17 | 0.77 |
| (1,974) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:78:LEU:HD13 | 17 | 0.77 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD11 | 17 | 0.77 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD12 | 17 | 0.77 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD13 | 17 | 0.77 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD21 | 1 | 0.77 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD22 | 1 | 0.77 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD23 | 1 | 0.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 8 | 0.77 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 8 | 0.77 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 8 | 0.77 |
| (1,601) | 1:A:5:GLU:HA | 1:A:8:GLN:HB2 | 10 | 0.77 |
| (1,601) | 1:A:5:GLU:HA | 1:A:8:GLN:HB2 | 11 | 0.77 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB2 | 7 | 0.77 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB2 | 7 | 0.77 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB2 | 7 | 0.77 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HB3 | 15 | 0.77 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HB3 | 15 | 0.77 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HB3 | 15 | 0.77 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HB3 | 18 | 0.77 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HB3 | 18 | 0.77 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HB3 | 18 | 0.77 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HB2 | 1 | 0.77 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HB2 | 1 | 0.77 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HB2 | 1 | 0.77 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 11 | 0.77 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD11 | 11 | 0.77 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD12 | 11 | 0.77 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD13 | 11 | 0.77 |
| (1,248) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:H | 3 | 0.77 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 19 | 0.77 |
| (1,230) | 1:A:70:CYS:HB3 | 1:A:76:ASN:H | 15 | 0.77 |
| (1,2158) | 1:A:48:SER:HB2 | 1:A:49:GLY:H | 12 | 0.77 |
| (1,1918) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HB3 | 3 | 0.77 |
| (1,1918) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HB3 | 4 | 0.77 |
| (1,1918) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HB3 | 7 | 0.77 |
| (1,1918) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HB3 | 8 | 0.77 |
| (1,1918) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HB3 | 14 | 0.77 |
| (1,1918) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HB3 | 17 | 0.77 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG11 | 1 | 0.77 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG12 | 1 | 0.77 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG13 | 1 | 0.77 |
| (1,1869) | 1:A:84:GLU:H | 1:A:85:MET:HG2 | 19 | 0.77 |
| (1,1843) | 1:A:23:THR:H | 1:A:74:GLN:HE21 | 14 | 0.77 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 1 | 0.77 |
| (1,1710) | 1:A:39:ILE:H | 1:A:48:SER:HB2 | 16 | 0.77 |
| (1,1560) | 1:A:69:MET:HA | 1:A:70:CYS:HB3 | 15 | 0.77 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD11 | 10 | 0.77 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD12 | 10 | 0.77 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD13 | 10 | 0.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1254) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HG2 | 4 | 0.77 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:110:TYR:HB2 | 6 | 0.77 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:110:TYR:HB2 | 6 | 0.77 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:110:TYR:HB2 | 6 | 0.77 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 1 | 0.76 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 1 | 0.76 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 1 | 0.76 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 4 | 0.76 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 4 | 0.76 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 4 | 0.76 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 10 | 0.76 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 10 | 0.76 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 10 | 0.76 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 13 | 0.76 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 13 | 0.76 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 13 | 0.76 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 15 | 0.76 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 15 | 0.76 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 15 | 0.76 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 2 | 0.76 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 2 | 0.76 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 2 | 0.76 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD11 | 5 | 0.76 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD12 | 5 | 0.76 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HD13 | 5 | 0.76 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD11 | 5 | 0.76 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD12 | 5 | 0.76 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HD13 | 5 | 0.76 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD11 | 5 | 0.76 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD12 | 5 | 0.76 |
| (1,908) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HD13 | 5 | 0.76 |
| (1,887) | 1:A:20:LYS:HG2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 14 | 0.76 |
| (1,868) | 1:A:63:LEU:HD11 | 1:A:83:SER:HB2 | 12 | 0.76 |
| (1,868) | 1:A:63:LEU:HD12 | 1:A:83:SER:HB2 | 12 | 0.76 |
| (1,868) | 1:A:63:LEU:HD13 | 1:A:83:SER:HB2 | 12 | 0.76 |
| (1,868) | 1:A:63:LEU:HD21 | 1:A:83:SER:HB2 | 12 | 0.76 |
| (1,868) | 1:A:63:LEU:HD22 | 1:A:83:SER:HB2 | 12 | 0.76 |
| (1,868) | 1:A:63:LEU:HD23 | 1:A:83:SER:HB2 | 12 | 0.76 |
| (1,824) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:101:LEU:HD21 | 3 | 0.76 |
| (1,824) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:101:LEU:HD22 | 3 | 0.76 |
| (1,824) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:101:LEU:HD23 | 3 | 0.76 |
| (1,688) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:29:PRO:HB2 | 17 | 0.76 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,688) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:29:PRO:HB2 | 17 | 0.76 |
| (1,688) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:29:PRO:HB2 | 17 | 0.76 |
| (1,561) | 1:A:45:ASN:HA | 1:A:46:ARG:HB3 | 17 | 0.76 |
| (1,537) | 1:A:65:MET:HG3 | 1:A:66:THR:H | 9 | 0.76 |
| (1,537) | 1:A:65:MET:HG3 | 1:A:66:THR:H | 11 | 0.76 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 8 | 0.76 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 11 | 0.76 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD11 | 7 | 0.76 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD12 | 7 | 0.76 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD13 | 7 | 0.76 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD11 | 7 | 0.76 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD12 | 7 | 0.76 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD13 | 7 | 0.76 |
| (1,1939) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:68:MET:HG3 | 10 | 0.76 |
| (1,1918) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HB3 | 1 | 0.76 |
| (1,1918) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HB3 | 5 | 0.76 |
| (1,1918) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HB3 | 19 | 0.76 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 2 | 0.76 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 9 | 0.76 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 10 | 0.76 |
| (1,1401) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HB3 | 14 | 0.76 |
| (1,1401) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HB3 | 14 | 0.76 |
| (1,1401) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HB3 | 14 | 0.76 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE1 | 12 | 0.76 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE2 | 12 | 0.76 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE3 | 12 | 0.76 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 4 | 0.76 |
| (1,1259) | 1:A:39:ILE:HA | 1:A:40:SER:HB3 | 14 | 0.76 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD11 | 8 | 0.76 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD12 | 8 | 0.76 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD13 | 8 | 0.76 |
| (1,1174) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HG3 | 12 | 0.76 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 13 | 0.75 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 13 | 0.75 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 13 | 0.75 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD11 | 1:A:116:MET:H | 4 | 0.75 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD12 | 1:A:116:MET:H | 4 | 0.75 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD13 | 1:A:116:MET:H | 4 | 0.75 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD11 | 1:A:116:MET:H | 11 | 0.75 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD12 | 1:A:116:MET:H | 11 | 0.75 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD13 | 1:A:116:MET:H | 11 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 5 | 0.75 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 5 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 5 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 5 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 5 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 5 | 0.75 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD21 | 5 | 0.75 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD22 | 5 | 0.75 |
| (1,913) | 1:A:93:ASP:H | 1:A:99:LEU:HD23 | 5 | 0.75 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD11 | 6 | 0.75 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD12 | 6 | 0.75 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD13 | 6 | 0.75 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD11 | 17 | 0.75 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD12 | 17 | 0.75 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD13 | 17 | 0.75 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 17 | 0.75 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 17 | 0.75 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 17 | 0.75 |
| (1,561) | 1:A:45:ASN:HA | 1:A:46:ARG:HB3 | 9 | 0.75 |
| (1,457) | 1:A:69:MET:HB2 | 1:A:70:CYS:H | 11 | 0.75 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 4 | 0.75 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 13 | 0.75 |
| (1,2198) | 1:A:9:HIS:HB3 | 1:A:9:HIS:HD2 | 11 | 0.75 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 9 | 0.75 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD22 | 9 | 0.75 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD23 | 9 | 0.75 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 9 | 0.75 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 9 | 0.75 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 9 | 0.75 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 11 | 0.75 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD22 | 11 | 0.75 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD23 | 11 | 0.75 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 11 | 0.75 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 11 | 0.75 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 11 | 0.75 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 15 | 0.75 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD22 | 15 | 0.75 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD23 | 15 | 0.75 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 15 | 0.75 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 15 | 0.75 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 15 | 0.75 |
| (1,1976) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ASN:H | 9 | 0.75 |
| (1,1918) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HB3 | 2 | 0.75 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1843) | 1:A:23:THR:H | 1:A:74:GLN:HE21 | 11 | 0.75 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HB3 | 15 | 0.75 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HB3 | 15 | 0.75 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HB3 | 15 | 0.75 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HB3 | 15 | 0.75 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HB3 | 15 | 0.75 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HB3 | 15 | 0.75 |
| (1,1792) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 4 | 0.75 |
| (1,1188) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:84:GLU:HB2 | 2 | 0.75 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:31:ILE:H | 9 | 0.75 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:31:ILE:H | 9 | 0.75 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:31:ILE:H | 9 | 0.75 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:31:ILE:H | 17 | 0.75 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:31:ILE:H | 17 | 0.75 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:31:ILE:H | 17 | 0.75 |
| (1,1095) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:H | 14 | 0.75 |
| (1,1095) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:H | 14 | 0.75 |
| (1,1095) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:H | 14 | 0.75 |
| (1,1060) | 1:A:46:ARG:HB3 | 1:A:66:THR:HG21 | 11 | 0.75 |
| (1,1060) | 1:A:46:ARG:HB3 | 1:A:66:THR:HG22 | 11 | 0.75 |
| (1,1060) | 1:A:46:ARG:HB3 | 1:A:66:THR:HG23 | 11 | 0.75 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 14 | 0.74 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 14 | 0.74 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 14 | 0.74 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 6 | 0.74 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 6 | 0.74 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 6 | 0.74 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 18 | 0.74 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 18 | 0.74 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 18 | 0.74 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 0.74 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 0.74 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 0.74 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD11 | 13 | 0.74 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD12 | 13 | 0.74 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD13 | 13 | 0.74 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 2 | 0.74 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 2 | 0.74 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 2 | 0.74 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:81:THR:HB | 4 | 0.74 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:81:THR:HB | 4 | 0.74 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:81:THR:HB | 4 | 0.74 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HD11 | 6 | 0.74 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HD12 | 6 | 0.74 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HD13 | 6 | 0.74 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HD11 | 6 | 0.74 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HD12 | 6 | 0.74 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HD13 | 6 | 0.74 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HD11 | 6 | 0.74 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HD12 | 6 | 0.74 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HD13 | 6 | 0.74 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 8 | 0.74 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 8 | 0.74 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 8 | 0.74 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 8 | 0.74 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 8 | 0.74 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 8 | 0.74 |
| (1,588) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:85:MET:H | 3 | 0.74 |
| (1,521) | 1:A:68:MET:HG3 | 1:A:69:MET:H | 19 | 0.74 |
| (1,458) | 1:A:69:MET:H | 1:A:69:MET:HB2 | 14 | 0.74 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 18 | 0.74 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD11 | 12 | 0.74 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD12 | 12 | 0.74 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD13 | 12 | 0.74 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD11 | 12 | 0.74 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD12 | 12 | 0.74 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD13 | 12 | 0.74 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD11 | 13 | 0.74 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD12 | 13 | 0.74 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD13 | 13 | 0.74 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD11 | 13 | 0.74 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD12 | 13 | 0.74 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD13 | 13 | 0.74 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 8 | 0.74 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 8 | 0.74 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 8 | 0.74 |
| (1,1918) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HB3 | 16 | 0.74 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 16 | 0.74 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 16 | 0.74 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 16 | 0.74 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE1 | 1:A:83:SER:HB3 | 1 | 0.74 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE2 | 1:A:83:SER:HB3 | 1 | 0.74 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE3 | 1:A:83:SER:HB3 | 1 | 0.74 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE1 | 1:A:83:SER:HB3 | 17 | 0.74 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE2 | 1:A:83:SER:HB3 | 17 | 0.74 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE3 | 1:A:83:SER:HB3 | 17 | 0.74 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 8 | 0.74 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 8 | 0.74 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 8 | 0.74 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 5 | 0.74 |
| (1,1259) | 1:A:39:ILE:HA | 1:A:40:SER:HB3 | 19 | 0.74 |
| (1,1254) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HG2 | 8 | 0.74 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE22 | 7 | 0.74 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE22 | 7 | 0.74 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE22 | 7 | 0.74 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:31:ILE:H | 11 | 0.74 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:31:ILE:H | 11 | 0.74 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:31:ILE:H | 11 | 0.74 |
| (1,1097) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:109:THR:H | 3 | 0.74 |
| (1,1097) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:109:THR:H | 3 | 0.74 |
| (1,1097) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:109:THR:H | 3 | 0.74 |
| (1,104) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HG3 | 11 | 0.74 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:93:ASP:H | 8 | 0.74 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:93:ASP:H | 8 | 0.74 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:93:ASP:H | 8 | 0.74 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:93:ASP:H | 15 | 0.74 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:93:ASP:H | 15 | 0.74 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:93:ASP:H | 15 | 0.74 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD11 | 1:A:116:MET:H | 1 | 0.73 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD12 | 1:A:116:MET:H | 1 | 0.73 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD13 | 1:A:116:MET:H | 1 | 0.73 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD11 | 1:A:116:MET:H | 6 | 0.73 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD12 | 1:A:116:MET:H | 6 | 0.73 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD13 | 1:A:116:MET:H | 6 | 0.73 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD11 | 1:A:116:MET:H | 14 | 0.73 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD12 | 1:A:116:MET:H | 14 | 0.73 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD13 | 1:A:116:MET:H | 14 | 0.73 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 11 | 0.73 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 11 | 0.73 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 11 | 0.73 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 0.73 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 0.73 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 0.73 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 10 | 0.73 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 10 | 0.73 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 10 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 16 | 0.73 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 16 | 0.73 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 16 | 0.73 |
| (1,794) | 1:A:70:CYS:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 11 | 0.73 |
| (1,794) | 1:A:70:CYS:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 11 | 0.73 |
| (1,794) | 1:A:70:CYS:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 11 | 0.73 |
| (1,791) | 1:A:47:PHE:HZ | 1:A:86:LEU:HD21 | 12 | 0.73 |
| (1,791) | 1:A:47:PHE:HZ | 1:A:86:LEU:HD22 | 12 | 0.73 |
| (1,791) | 1:A:47:PHE:HZ | 1:A:86:LEU:HD23 | 12 | 0.73 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD21 | 8 | 0.73 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD22 | 8 | 0.73 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD23 | 8 | 0.73 |
| (1,698) | 1:A:42:SER:HB2 | 1:A:46:ARG:HG3 | 3 | 0.73 |
| (1,537) | 1:A:65:MET:HG3 | 1:A:66:THR:H | 16 | 0.73 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 10 | 0.73 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 17 | 0.73 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD11 | 7 | 0.73 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD12 | 7 | 0.73 |
| (1,2191) | 1:A:33:PHE:HZ | 1:A:99:LEU:HD13 | 7 | 0.73 |
| (1,2140) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:106:GLN:HE22 | 19 | 0.73 |
| (1,1918) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HB3 | 10 | 0.73 |
| (1,1918) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HB3 | 11 | 0.73 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HB3 | 8 | 0.73 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HB3 | 8 | 0.73 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HB3 | 8 | 0.73 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HB3 | 8 | 0.73 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HB3 | 8 | 0.73 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HB3 | 8 | 0.73 |
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 1 | 0.73 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 1 | 0.73 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 17 | 0.73 |
| (1,1560) | 1:A:69:MET:HA | 1:A:70:CYS:HB3 | 2 | 0.73 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD11 | 11 | 0.73 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD12 | 11 | 0.73 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD13 | 11 | 0.73 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD11 | 11 | 0.73 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD12 | 11 | 0.73 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD13 | 11 | 0.73 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD11 | 11 | 0.73 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD12 | 11 | 0.73 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD13 | 11 | 0.73 |
| (1,1259) | 1:A:39:ILE:HA | 1:A:40:SER:HB3 | 1 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE22 | 12 | 0.73 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE22 | 12 | 0.73 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE22 | 12 | 0.73 |
| (1,1087) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:75:LEU:HD21 | 5 | 0.73 |
| (1,1087) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:75:LEU:HD22 | 5 | 0.73 |
| (1,1087) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:75:LEU:HD23 | 5 | 0.73 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:93:ASP:H | 10 | 0.73 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:93:ASP:H | 10 | 0.73 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:93:ASP:H | 10 | 0.73 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD11 | 1:A:116:MET:H | 13 | 0.72 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD12 | 1:A:116:MET:H | 13 | 0.72 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD13 | 1:A:116:MET:H | 13 | 0.72 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 8 | 0.72 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 8 | 0.72 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 8 | 0.72 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 9 | 0.72 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 9 | 0.72 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 9 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 0.72 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 0.72 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 4 | 0.72 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 4 | 0.72 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 4 | 0.72 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 7 | 0.72 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 7 | 0.72 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 7 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.72 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.72 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.72 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 0.72 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 0.72 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 0.72 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 0.72 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 0.72 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 0.72 |
| (1,686) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:29:PRO:HB3 | 6 | 0.72 |
| (1,686) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:29:PRO:HB3 | 6 | 0.72 |
| (1,686) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:29:PRO:HB3 | 6 | 0.72 |
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 9 | 0.72 |
| (1,588) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:85:MET:H | 8 | 0.72 |
| (1,570) | 1:A:1:MET:HG2 | 1:A:2:VAL:HG21 | 4 | 0.72 |
| (1,570) | 1:A:1:MET:HG2 | 1:A:2:VAL:HG22 | 4 | 0.72 |
| (1,570) | 1:A:1:MET:HG2 | 1:A:2:VAL:HG23 | 4 | 0.72 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 4 | 0.72 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 13 | 0.72 |
| (1,2074) | 1:A:26:LYS:HB2 | 1:A:27:ASN:HD22 | 15 | 0.72 |
| (1,1917) | 1:A:24:SER:HB2 | 1:A:26:LYS:H | 6 | 0.72 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD11 | 11 | 0.72 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD12 | 11 | 0.72 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD13 | 11 | 0.72 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD11 | 11 | 0.72 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD12 | 11 | 0.72 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD13 | 11 | 0.72 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD11 | 11 | 0.72 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD12 | 11 | 0.72 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD13 | 11 | 0.72 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD11 | 17 | 0.72 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD12 | 17 | 0.72 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD13 | 17 | 0.72 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD11 | 17 | 0.72 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD12 | 17 | 0.72 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD13 | 17 | 0.72 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD11 | 17 | 0.72 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD12 | 17 | 0.72 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD13 | 17 | 0.72 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:98:GLN:HA | 1 | 0.72 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:98:GLN:HA | 1 | 0.72 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:98:GLN:HA | 1 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 4 | 0.72 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 4 | 0.72 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 4 | 0.72 |
| (1,1259) | 1:A:39:ILE:HA | 1:A:40:SER:HB3 | 7 | 0.72 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB1 | 1:A:86:LEU:HB2 | 17 | 0.72 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HB2 | 17 | 0.72 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB3 | 1:A:86:LEU:HB2 | 17 | 0.72 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 3 | 0.71 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 3 | 0.71 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 3 | 0.71 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 11 | 0.71 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 11 | 0.71 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 11 | 0.71 |
| (1,948) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:98:GLN:H | 18 | 0.71 |
| (1,948) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:98:GLN:H | 18 | 0.71 |
| (1,948) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:98:GLN:H | 18 | 0.71 |
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 14 | 0.71 |
| (1,617) | 1:A:31:ILE:HG12 | 1:A:41:GLY:HA2 | 19 | 0.71 |
| (1,608) | 1:A:98:GLN:HA | 1:A:111:LYS:HD2 | 14 | 0.71 |
| (1,541) | 1:A:63:LEU:HG | 1:A:65:MET:HG3 | 17 | 0.71 |
| (1,521) | 1:A:68:MET:HG3 | 1:A:69:MET:H | 7 | 0.71 |
| (1,458) | 1:A:69:MET:H | 1:A:69:MET:HB2 | 7 | 0.71 |
| (1,458) | 1:A:69:MET:H | 1:A:69:MET:HB2 | 17 | 0.71 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HB2 | 2 | 0.71 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HB2 | 2 | 0.71 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HB2 | 2 | 0.71 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD11 | 19 | 0.71 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD12 | 19 | 0.71 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD13 | 19 | 0.71 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 8 | 0.71 |
| (1,1869) | 1:A:84:GLU:H | 1:A:85:MET:HG2 | 5 | 0.71 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 17 | 0.71 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 15 | 0.71 |
| (1,1560) | 1:A:69:MET:HA | 1:A:70:CYS:HB3 | 6 | 0.71 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 8 | 0.71 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 8 | 0.71 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 8 | 0.71 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 9 | 0.71 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB1 | 9 | 0.71 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB2 | 9 | 0.71 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB3 | 9 | 0.71 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB1 | 9 | 0.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB2 | 9 | 0.71 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB3 | 9 | 0.71 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB1 | 9 | 0.71 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB2 | 9 | 0.71 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB3 | 9 | 0.71 |
| (1,1089) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HG21 | 4 | 0.71 |
| (1,1089) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HG22 | 4 | 0.71 |
| (1,1089) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HG23 | 4 | 0.71 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 11 | 0.7 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 11 | 0.7 |
| (1,994) | 1:A:115:LEU:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 11 | 0.7 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 7 | 0.7 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 7 | 0.7 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 7 | 0.7 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 19 | 0.7 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 19 | 0.7 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 19 | 0.7 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 13 | 0.7 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 13 | 0.7 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 13 | 0.7 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 7 | 0.7 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 7 | 0.7 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 7 | 0.7 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 7 | 0.7 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 7 | 0.7 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 7 | 0.7 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 7 | 0.7 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 7 | 0.7 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 7 | 0.7 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD21 | 7 | 0.7 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD22 | 7 | 0.7 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD23 | 7 | 0.7 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD21 | 7 | 0.7 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD22 | 7 | 0.7 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD23 | 7 | 0.7 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD21 | 7 | 0.7 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD22 | 7 | 0.7 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD23 | 7 | 0.7 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 13 | 0.7 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 13 | 0.7 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 13 | 0.7 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 0.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 0.7 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 0.7 |
| (1,828) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:101:LEU:HD21 | 3 | 0.7 |
| (1,828) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:101:LEU:HD22 | 3 | 0.7 |
| (1,828) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:101:LEU:HD23 | 3 | 0.7 |
| (1,607) | 1:A:8:GLN:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 10 | 0.7 |
| (1,458) | 1:A:69:MET:H | 1:A:69:MET:HB2 | 9 | 0.7 |
| (1,456) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:68:MET:HB2 | 9 | 0.7 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 15 | 0.7 |
| (1,209) | 1:A:113:ALA:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 17 | 0.7 |
| (1,1869) | 1:A:84:GLU:H | 1:A:85:MET:HG2 | 2 | 0.7 |
| (1,1869) | 1:A:84:GLU:H | 1:A:85:MET:HG2 | 16 | 0.7 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 4 | 0.7 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 4 | 0.7 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 4 | 0.7 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 8 | 0.7 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 8 | 0.7 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 8 | 0.7 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE1 | 7 | 0.7 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE2 | 7 | 0.7 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE3 | 7 | 0.7 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 18 | 0.7 |
| (1,117) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 16 | 0.7 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:93:ASP:H | 4 | 0.7 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:93:ASP:H | 4 | 0.7 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:93:ASP:H | 4 | 0.7 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:93:ASP:H | 5 | 0.7 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:93:ASP:H | 5 | 0.7 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:93:ASP:H | 5 | 0.7 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG21 | 4 | 0.7 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG22 | 4 | 0.7 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG23 | 4 | 0.7 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG21 | 19 | 0.7 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG22 | 19 | 0.7 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG23 | 19 | 0.7 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 5 | 0.69 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 5 | 0.69 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 5 | 0.69 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 12 | 0.69 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 12 | 0.69 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 12 | 0.69 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 9 | 0.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 9 | 0.69 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 9 | 0.69 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 12 | 0.69 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 12 | 0.69 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 12 | 0.69 |
| (1,887) | 1:A:20:LYS:HG2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 8 | 0.69 |
| (1,880) | 1:A:98:GLN:HA | 1:A:111:LYS:HG3 | 7 | 0.69 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HD11 | 3 | 0.69 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HD12 | 3 | 0.69 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD11 | 1:A:86:LEU:HD13 | 3 | 0.69 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HD11 | 3 | 0.69 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HD12 | 3 | 0.69 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD12 | 1:A:86:LEU:HD13 | 3 | 0.69 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HD11 | 3 | 0.69 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HD12 | 3 | 0.69 |
| (1,754) | 1:A:58:LEU:HD13 | 1:A:86:LEU:HD13 | 3 | 0.69 |
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 3 | 0.69 |
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 6 | 0.69 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HB2 | 15 | 0.69 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HB2 | 15 | 0.69 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HB2 | 15 | 0.69 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 14 | 0.69 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD22 | 14 | 0.69 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD23 | 14 | 0.69 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 14 | 0.69 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 14 | 0.69 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 14 | 0.69 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 4 | 0.69 |
| (1,209) | 1:A:113:ALA:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 15 | 0.69 |
| (1,2074) | 1:A:26:LYS:HB2 | 1:A:27:ASN:HD22 | 7 | 0.69 |
| (1,2016) | 1:A:106:GLN:HE22 | 1:A:107:THR:H | 3 | 0.69 |
| (1,2016) | 1:A:106:GLN:HE22 | 1:A:107:THR:H | 17 | 0.69 |
| (1,1972) | 1:A:8:GLN:HG2 | 1:A:35:GLU:H | 10 | 0.69 |
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 18 | 0.69 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 11 | 0.69 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 11 | 0.69 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 11 | 0.69 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:31:ILE:H | 2 | 0.69 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:31:ILE:H | 2 | 0.69 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:31:ILE:H | 2 | 0.69 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 0.68 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 0.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 0.68 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 3 | 0.68 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 3 | 0.68 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 3 | 0.68 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 6 | 0.68 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 6 | 0.68 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 6 | 0.68 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 0.68 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 0.68 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 0.68 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD11 | 15 | 0.68 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD12 | 15 | 0.68 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD13 | 15 | 0.68 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD21 | 1:A:100:THR:H | 15 | 0.68 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD22 | 1:A:100:THR:H | 15 | 0.68 |
| (1,892) | 1:A:99:LEU:HD23 | 1:A:100:THR:H | 15 | 0.68 |
| (1,747) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HG | 15 | 0.68 |
| (1,698) | 1:A:42:SER:HB2 | 1:A:46:ARG:HG3 | 1 | 0.68 |
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 15 | 0.68 |
| (1,577) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HB3 | 1 | 0.68 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB2 | 9 | 0.68 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB2 | 9 | 0.68 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB2 | 9 | 0.68 |
| (1,537) | 1:A:65:MET:HG3 | 1:A:66:THR:H | 1 | 0.68 |
| (1,537) | 1:A:65:MET:HG3 | 1:A:66:THR:H | 3 | 0.68 |
| (1,521) | 1:A:68:MET:HG3 | 1:A:69:MET:H | 6 | 0.68 |
| (1,2198) | 1:A:9:HIS:HB3 | 1:A:9:HIS:HD2 | 6 | 0.68 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 1 | 0.68 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 13 | 0.68 |
| (1,2116) | 1:A:105:LYS:H | 1:A:105:LYS:HG3 | 17 | 0.68 |
| (1,1918) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HB3 | 15 | 0.68 |
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 2 | 0.68 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE1 | 1:A:83:SER:HB3 | 7 | 0.68 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE2 | 1:A:83:SER:HB3 | 7 | 0.68 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE3 | 1:A:83:SER:HB3 | 7 | 0.68 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:51:GLY:HA2 | 4 | 0.68 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:51:GLY:HA2 | 4 | 0.68 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:51:GLY:HA2 | 4 | 0.68 |
| (1,1259) | 1:A:39:ILE:HA | 1:A:40:SER:HB3 | 17 | 0.68 |
| (1,1255) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HB3 | 4 | 0.68 |
| (1,1255) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HB3 | 11 | 0.68 |
| (1,1255) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HB3 | 15 | 0.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1255) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HB3 | 16 | 0.68 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE22 | 9 | 0.68 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE22 | 9 | 0.68 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE22 | 9 | 0.68 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:93:ASP:H | 13 | 0.68 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:93:ASP:H | 13 | 0.68 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:93:ASP:H | 13 | 0.68 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 17 | 0.67 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 17 | 0.67 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 17 | 0.67 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 18 | 0.67 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD12 | 18 | 0.67 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD13 | 18 | 0.67 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG21 | 5 | 0.67 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG22 | 5 | 0.67 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG23 | 5 | 0.67 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 12 | 0.67 |
| (1,2198) | 1:A:9:HIS:HB3 | 1:A:9:HIS:HD2 | 10 | 0.67 |
| (1,2198) | 1:A:9:HIS:HB3 | 1:A:9:HIS:HD2 | 17 | 0.67 |
| (1,1869) | 1:A:84:GLU:H | 1:A:85:MET:HG2 | 9 | 0.67 |
| (1,1869) | 1:A:84:GLU:H | 1:A:85:MET:HG2 | 11 | 0.67 |
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 14 | 0.67 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:51:GLY:HA2 | 5 | 0.67 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 5 | 0.67 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 5 | 0.67 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE1 | 1 | 0.67 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE2 | 1 | 0.67 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE3 | 1 | 0.67 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:51:GLY:HA2 | 13 | 0.67 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:51:GLY:HA2 | 13 | 0.67 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:51:GLY:HA2 | 13 | 0.67 |
| (1,1259) | 1:A:39:ILE:HA | 1:A:40:SER:HB3 | 4 | 0.67 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG21 | 11 | 0.67 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG22 | 11 | 0.67 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG23 | 11 | 0.67 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:H | 7 | 0.67 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:H | 7 | 0.67 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:H | 7 | 0.67 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:H | 9 | 0.67 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:H | 9 | 0.67 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:H | 9 | 0.67 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:H | 16 | 0.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:H | 16 | 0.67 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:H | 16 | 0.67 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB1 | 4 | 0.67 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB2 | 4 | 0.67 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB3 | 4 | 0.67 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HG2 | 8 | 0.67 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HG2 | 8 | 0.67 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HG2 | 8 | 0.67 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:93:ASP:H | 2 | 0.67 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:93:ASP:H | 2 | 0.67 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:93:ASP:H | 2 | 0.67 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 18 | 0.66 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 18 | 0.66 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 18 | 0.66 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 15 | 0.66 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 15 | 0.66 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 15 | 0.66 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 0.66 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 0.66 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 0.66 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 0.66 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 0.66 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 0.66 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 0.66 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 0.66 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 0.66 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 0.66 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 0.66 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 0.66 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 0.66 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 0.66 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 0.66 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 0.66 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 0.66 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 0.66 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 0.66 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 0.66 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 0.66 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 5 | 0.66 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 5 | 0.66 |
| (1,961) | 1:A:58:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 5 | 0.66 |
| (1,848) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:84:GLU:HB2 | 14 | 0.66 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB3 | 6 | 0.66 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB3 | 6 | 0.66 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB3 | 6 | 0.66 |
| (1,537) | 1:A:65:MET:HG3 | 1:A:66:THR:H | 5 | 0.66 |
| (1,300) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 6 | 0.66 |
| (1,1918) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HB3 | 9 | 0.66 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 18 | 0.66 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HB3 | 18 | 0.66 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HB3 | 18 | 0.66 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HB3 | 18 | 0.66 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HB3 | 18 | 0.66 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HB3 | 18 | 0.66 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HB3 | 18 | 0.66 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:51:GLY:HA2 | 7 | 0.66 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 7 | 0.66 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 7 | 0.66 |
| (1,1255) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HB3 | 18 | 0.66 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG21 | 10 | 0.66 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG22 | 10 | 0.66 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG23 | 10 | 0.66 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD11 | 1:A:116:MET:H | 18 | 0.65 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD12 | 1:A:116:MET:H | 18 | 0.65 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD13 | 1:A:116:MET:H | 18 | 0.65 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 1 | 0.65 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 1 | 0.65 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 1 | 0.65 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 1 | 0.65 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 1 | 0.65 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 1 | 0.65 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 14 | 0.65 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 14 | 0.65 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 14 | 0.65 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:82:ILE:H | 7 | 0.65 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:82:ILE:H | 7 | 0.65 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:82:ILE:H | 7 | 0.65 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:101:LEU:HG | 10 | 0.65 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:101:LEU:HG | 10 | 0.65 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:101:LEU:HG | 10 | 0.65 |
| (1,887) | 1:A:20:LYS:HG2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 4 | 0.65 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 16 | 0.65 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 16 | 0.65 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 16 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 12 | 0.65 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 12 | 0.65 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 12 | 0.65 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 3 | 0.65 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 3 | 0.65 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 3 | 0.65 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 3 | 0.65 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 3 | 0.65 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 3 | 0.65 |
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 4 | 0.65 |
| (1,617) | 1:A:31:ILE:HG12 | 1:A:41:GLY:HA2 | 16 | 0.65 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB2 | 16 | 0.65 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB2 | 16 | 0.65 |
| (1,550) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB2 | 16 | 0.65 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 14 | 0.65 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 14 | 0.65 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 14 | 0.65 |
| (1,270) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:45:ASN:HD22 | 3 | 0.65 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 15 | 0.65 |
| (1,2198) | 1:A:9:HIS:HB3 | 1:A:9:HIS:HD2 | 2 | 0.65 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD11 | 8 | 0.65 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD12 | 8 | 0.65 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD13 | 8 | 0.65 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD11 | 8 | 0.65 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD12 | 8 | 0.65 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD13 | 8 | 0.65 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD11 | 9 | 0.65 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD12 | 9 | 0.65 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD13 | 9 | 0.65 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD11 | 9 | 0.65 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD12 | 9 | 0.65 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD13 | 9 | 0.65 |
| (1,2140) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:106:GLN:HE22 | 6 | 0.65 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 17 | 0.65 |
| (1,2098) | 1:A:72:ASN:HD21 | 1:A:74:GLN:HB2 | 18 | 0.65 |
| (1,1869) | 1:A:84:GLU:H | 1:A:85:MET:HG2 | 1 | 0.65 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 13 | 0.65 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:98:GLN:HA | 9 | 0.65 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:98:GLN:HA | 9 | 0.65 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:98:GLN:HA | 9 | 0.65 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 1 | 0.65 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 1 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 1 | 0.65 |
| (1,1259) | 1:A:39:ILE:HA | 1:A:40:SER:HB3 | 6 | 0.65 |
| (1,1259) | 1:A:39:ILE:HA | 1:A:40:SER:HB3 | 18 | 0.65 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 9 | 0.64 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 9 | 0.64 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 9 | 0.64 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 9 | 0.64 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 9 | 0.64 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 9 | 0.64 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 14 | 0.64 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 14 | 0.64 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 14 | 0.64 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 14 | 0.64 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 14 | 0.64 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 14 | 0.64 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD21 | 1:A:109:THR:H | 19 | 0.64 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD22 | 1:A:109:THR:H | 19 | 0.64 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD23 | 1:A:109:THR:H | 19 | 0.64 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 9 | 0.64 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD12 | 9 | 0.64 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD13 | 9 | 0.64 |
| (1,601) | 1:A:5:GLU:HA | 1:A:8:GLN:HB2 | 16 | 0.64 |
| (1,577) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HB3 | 6 | 0.64 |
| (1,561) | 1:A:45:ASN:HA | 1:A:46:ARG:HB3 | 7 | 0.64 |
| (1,264) | 1:A:80:ASN:HB3 | 1:A:81:THR:HA | 6 | 0.64 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 1 | 0.64 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 14 | 0.64 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD11 | 13 | 0.64 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD12 | 13 | 0.64 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD13 | 13 | 0.64 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD11 | 13 | 0.64 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD12 | 13 | 0.64 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD13 | 13 | 0.64 |
| (1,2016) | 1:A:106:GLN:HE22 | 1:A:107:THR:H | 18 | 0.64 |
| (1,1869) | 1:A:84:GLU:H | 1:A:85:MET:HG2 | 14 | 0.64 |
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 16 | 0.64 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 5 | 0.64 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:51:GLY:HA2 | 13 | 0.64 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 13 | 0.64 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 13 | 0.64 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE1 | 11 | 0.64 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE2 | 11 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE3 | 11 | 0.64 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 19 | 0.64 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 19 | 0.64 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 19 | 0.64 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 1 | 0.64 |
| (1,1259) | 1:A:39:ILE:HA | 1:A:40:SER:HB3 | 12 | 0.64 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD11 | 9 | 0.64 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD12 | 9 | 0.64 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD13 | 9 | 0.64 |
| (1,1255) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HB3 | 1 | 0.64 |
| (1,1255) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HB3 | 10 | 0.64 |
| (1,1255) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HB3 | 19 | 0.64 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE22 | 16 | 0.64 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE22 | 16 | 0.64 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE22 | 16 | 0.64 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:31:ILE:H | 5 | 0.64 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:31:ILE:H | 5 | 0.64 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:31:ILE:H | 5 | 0.64 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD11 | 1:A:116:MET:H | 2 | 0.63 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD12 | 1:A:116:MET:H | 2 | 0.63 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD13 | 1:A:116:MET:H | 2 | 0.63 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 10 | 0.63 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 10 | 0.63 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 10 | 0.63 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 10 | 0.63 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 10 | 0.63 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 10 | 0.63 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 11 | 0.63 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 11 | 0.63 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 11 | 0.63 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 11 | 0.63 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 11 | 0.63 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 11 | 0.63 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 16 | 0.63 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 16 | 0.63 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 16 | 0.63 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 10 | 0.63 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 10 | 0.63 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 10 | 0.63 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 10 | 0.63 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 10 | 0.63 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 10 | 0.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 10 | 0.63 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 10 | 0.63 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 10 | 0.63 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD21 | 10 | 0.63 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD22 | 10 | 0.63 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD23 | 10 | 0.63 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD21 | 10 | 0.63 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD22 | 10 | 0.63 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD23 | 10 | 0.63 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD21 | 10 | 0.63 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD22 | 10 | 0.63 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD23 | 10 | 0.63 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD11 | 15 | 0.63 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD12 | 15 | 0.63 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD13 | 15 | 0.63 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 15 | 0.63 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 15 | 0.63 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 15 | 0.63 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD11 | 2 | 0.63 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD12 | 2 | 0.63 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD13 | 2 | 0.63 |
| (1,63) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 3 | 0.63 |
| (1,63) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 3 | 0.63 |
| (1,588) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:85:MET:H | 17 | 0.63 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HB3 | 9 | 0.63 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HB3 | 9 | 0.63 |
| (1,548) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HB3 | 9 | 0.63 |
| (1,521) | 1:A:68:MET:HG3 | 1:A:69:MET:H | 16 | 0.63 |
| (1,521) | 1:A:68:MET:HG3 | 1:A:69:MET:H | 18 | 0.63 |
| (1,456) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:68:MET:HB2 | 5 | 0.63 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HB3 | 10 | 0.63 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HB3 | 10 | 0.63 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HB3 | 10 | 0.63 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 5 | 0.63 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG21 | 7 | 0.63 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG22 | 7 | 0.63 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG23 | 7 | 0.63 |
| (1,2198) | 1:A:9:HIS:HB3 | 1:A:9:HIS:HD2 | 3 | 0.63 |
| (1,2140) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:106:GLN:HE22 | 1 | 0.63 |
| (1,2074) | 1:A:26:LYS:HB2 | 1:A:27:ASN:HD22 | 6 | 0.63 |
| (1,1869) | 1:A:84:GLU:H | 1:A:85:MET:HG2 | 8 | 0.63 |
| (1,1869) | 1:A:84:GLU:H | 1:A:85:MET:HG2 | 18 | 0.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 17 | 0.63 |
| (1,1686) | 1:A:111:LYS:HD2 | 1:A:113:ALA:H | 18 | 0.63 |
| (1,1560) | 1:A:69:MET:HA | 1:A:70:CYS:HB3 | 1 | 0.63 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD11 | 14 | 0.63 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD12 | 14 | 0.63 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD13 | 14 | 0.63 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD11 | 14 | 0.63 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD12 | 14 | 0.63 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD13 | 14 | 0.63 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD11 | 14 | 0.63 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD12 | 14 | 0.63 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD13 | 14 | 0.63 |
| (1,1531) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:41:GLY:HA2 | 15 | 0.63 |
| (1,1531) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:41:GLY:HA2 | 15 | 0.63 |
| (1,1531) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:41:GLY:HA2 | 15 | 0.63 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 7 | 0.63 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 7 | 0.63 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 7 | 0.63 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:51:GLY:HA2 | 2 | 0.63 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:51:GLY:HA2 | 2 | 0.63 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:51:GLY:HA2 | 2 | 0.63 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:51:GLY:HA2 | 14 | 0.63 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:51:GLY:HA2 | 14 | 0.63 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:51:GLY:HA2 | 14 | 0.63 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:51:GLY:HA2 | 18 | 0.63 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:51:GLY:HA2 | 18 | 0.63 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:51:GLY:HA2 | 18 | 0.63 |
| (1,1255) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HB3 | 13 | 0.63 |
| (1,1229) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:106:GLN:HE22 | 8 | 0.63 |
| (1,1229) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:106:GLN:HE22 | 8 | 0.63 |
| (1,1229) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:106:GLN:HE22 | 8 | 0.63 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE22 | 19 | 0.63 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE22 | 19 | 0.63 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE22 | 19 | 0.63 |
| (1,1103) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:109:THR:HB | 17 | 0.63 |
| (1,1103) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:109:THR:HB | 17 | 0.63 |
| (1,1103) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:109:THR:HB | 17 | 0.63 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB1 | 1:A:86:LEU:HB2 | 14 | 0.63 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HB2 | 14 | 0.63 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB3 | 1:A:86:LEU:HB2 | 14 | 0.63 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:101:LEU:HG | 12 | 0.62 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:101:LEU:HG | 12 | 0.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:101:LEU:HG | 12 | 0.62 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:111:LYS:H | 5 | 0.62 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:111:LYS:H | 5 | 0.62 |
| (1,901) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:111:LYS:H | 5 | 0.62 |
| (1,561) | 1:A:45:ASN:HA | 1:A:46:ARG:HB3 | 13 | 0.62 |
| (1,537) | 1:A:65:MET:HG3 | 1:A:66:THR:H | 14 | 0.62 |
| (1,537) | 1:A:65:MET:HG3 | 1:A:66:THR:H | 18 | 0.62 |
| (1,521) | 1:A:68:MET:HG3 | 1:A:69:MET:H | 3 | 0.62 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HB2 | 8 | 0.62 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HB2 | 8 | 0.62 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HB2 | 8 | 0.62 |
| (1,352) | 1:A:8:GLN:HG3 | 1:A:37:MET:HA | 16 | 0.62 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 5 | 0.62 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 8 | 0.62 |
| (1,2198) | 1:A:9:HIS:HB3 | 1:A:9:HIS:HD2 | 9 | 0.62 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 1 | 0.62 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD22 | 1 | 0.62 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD23 | 1 | 0.62 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 1 | 0.62 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 1 | 0.62 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 1 | 0.62 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 6 | 0.62 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD22 | 6 | 0.62 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD23 | 6 | 0.62 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 6 | 0.62 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 6 | 0.62 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 6 | 0.62 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD11 | 6 | 0.62 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD12 | 6 | 0.62 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD13 | 6 | 0.62 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD11 | 6 | 0.62 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD12 | 6 | 0.62 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD13 | 6 | 0.62 |
| (1,2140) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:106:GLN:HE22 | 7 | 0.62 |
| (1,2116) | 1:A:105:LYS:H | 1:A:105:LYS:HG3 | 1 | 0.62 |
| (1,1976) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ASN:H | 18 | 0.62 |
| (1,1869) | 1:A:84:GLU:H | 1:A:85:MET:HG2 | 4 | 0.62 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 7 | 0.62 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 10 | 0.62 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD11 | 10 | 0.62 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD12 | 10 | 0.62 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD13 | 10 | 0.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD11 | 10 | 0.62 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD12 | 10 | 0.62 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD13 | 10 | 0.62 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD11 | 10 | 0.62 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD12 | 10 | 0.62 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD13 | 10 | 0.62 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:98:GLN:HA | 4 | 0.62 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:98:GLN:HA | 4 | 0.62 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:98:GLN:HA | 4 | 0.62 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:51:GLY:HA2 | 18 | 0.62 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 18 | 0.62 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 18 | 0.62 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE1 | 1:A:83:SER:HB3 | 2 | 0.62 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE2 | 1:A:83:SER:HB3 | 2 | 0.62 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE3 | 1:A:83:SER:HB3 | 2 | 0.62 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 13 | 0.62 |
| (1,1259) | 1:A:39:ILE:HA | 1:A:40:SER:HB3 | 8 | 0.62 |
| (1,1103) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:109:THR:HB | 14 | 0.62 |
| (1,1103) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:109:THR:HB | 14 | 0.62 |
| (1,1103) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:109:THR:HB | 14 | 0.62 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB1 | 1:A:86:LEU:HB2 | 10 | 0.62 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HB2 | 10 | 0.62 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB3 | 1:A:86:LEU:HB2 | 10 | 0.62 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:93:ASP:H | 19 | 0.62 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:93:ASP:H | 19 | 0.62 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:93:ASP:H | 19 | 0.62 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD11 | 1:A:116:MET:H | 7 | 0.61 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD12 | 1:A:116:MET:H | 7 | 0.61 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD13 | 1:A:116:MET:H | 7 | 0.61 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD21 | 2 | 0.61 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD22 | 2 | 0.61 |
| (1,989) | 1:A:112:LEU:HA | 1:A:112:LEU:HD23 | 2 | 0.61 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD11 | 10 | 0.61 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD12 | 10 | 0.61 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD13 | 10 | 0.61 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD11 | 12 | 0.61 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD12 | 12 | 0.61 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD13 | 12 | 0.61 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD11 | 15 | 0.61 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD12 | 15 | 0.61 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD13 | 15 | 0.61 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD21 | 18 | 0.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD22 | 18 | 0.61 |
| (1,778) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD23 | 18 | 0.61 |
| (1,747) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HG | 13 | 0.61 |
| (1,661) | 1:A:98:GLN:HG3 | 1:A:109:THR:HB | 11 | 0.61 |
| (1,577) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HB3 | 11 | 0.61 |
| (1,561) | 1:A:45:ASN:HA | 1:A:46:ARG:HB3 | 1 | 0.61 |
| (1,537) | 1:A:65:MET:HG3 | 1:A:66:THR:H | 2 | 0.61 |
| (1,456) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:68:MET:HB2 | 8 | 0.61 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 10 | 0.61 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 12 | 0.61 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 14 | 0.61 |
| (1,356) | 1:A:5:GLU:HA | 1:A:8:GLN:HG3 | 5 | 0.61 |
| (1,310) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:111:LYS:HG3 | 1 | 0.61 |
| (1,300) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 18 | 0.61 |
| (1,2198) | 1:A:9:HIS:HB3 | 1:A:9:HIS:HD2 | 1 | 0.61 |
| (1,209) | 1:A:113:ALA:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 4 | 0.61 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG11 | 10 | 0.61 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG12 | 10 | 0.61 |
| (1,1895) | 1:A:17:VAL:H | 1:A:22:VAL:HG13 | 10 | 0.61 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HB3 | 19 | 0.61 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HB3 | 19 | 0.61 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HB3 | 19 | 0.61 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HB3 | 19 | 0.61 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HB3 | 19 | 0.61 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HB3 | 19 | 0.61 |
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 13 | 0.61 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD11 | 14 | 0.61 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD12 | 14 | 0.61 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD13 | 14 | 0.61 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:51:GLY:HA2 | 10 | 0.61 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 10 | 0.61 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 10 | 0.61 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE1 | 1:A:83:SER:HB3 | 12 | 0.61 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE2 | 1:A:83:SER:HB3 | 12 | 0.61 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE3 | 1:A:83:SER:HB3 | 12 | 0.61 |
| (1,1259) | 1:A:39:ILE:HA | 1:A:40:SER:HB3 | 9 | 0.61 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG21 | 9 | 0.61 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG22 | 9 | 0.61 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG23 | 9 | 0.61 |
| (1,1149) | 1:A:101:LEU:HD11 | 1:A:102:ALA:H | 13 | 0.61 |
| (1,1149) | 1:A:101:LEU:HD12 | 1:A:102:ALA:H | 13 | 0.61 |
| (1,1149) | 1:A:101:LEU:HD13 | 1:A:102:ALA:H | 13 | 0.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:93:ASP:H | 17 | 0.61 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:93:ASP:H | 17 | 0.61 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:93:ASP:H | 17 | 0.61 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 10 | 0.6 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 10 | 0.6 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 10 | 0.6 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 10 | 0.6 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 10 | 0.6 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 10 | 0.6 |
| (1,877) | 1:A:12:PHE:HD1 | 1:A:99:LEU:HD11 | 11 | 0.6 |
| (1,877) | 1:A:12:PHE:HD1 | 1:A:99:LEU:HD12 | 11 | 0.6 |
| (1,877) | 1:A:12:PHE:HD1 | 1:A:99:LEU:HD13 | 11 | 0.6 |
| (1,877) | 1:A:12:PHE:HD2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 11 | 0.6 |
| (1,877) | 1:A:12:PHE:HD2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 11 | 0.6 |
| (1,877) | 1:A:12:PHE:HD2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 11 | 0.6 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 3 | 0.6 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 3 | 0.6 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 3 | 0.6 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 3 | 0.6 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 3 | 0.6 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 3 | 0.6 |
| (1,605) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:8:GLN:HE22 | 7 | 0.6 |
| (1,577) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HB3 | 2 | 0.6 |
| (1,537) | 1:A:65:MET:HG3 | 1:A:66:THR:H | 4 | 0.6 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD11 | 5 | 0.6 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD12 | 5 | 0.6 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD13 | 5 | 0.6 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD11 | 5 | 0.6 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD12 | 5 | 0.6 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD13 | 5 | 0.6 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 7 | 0.6 |
| (1,1560) | 1:A:69:MET:HA | 1:A:70:CYS:HB3 | 7 | 0.6 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:51:GLY:HA2 | 2 | 0.6 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 2 | 0.6 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 2 | 0.6 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 19 | 0.6 |
| (1,1259) | 1:A:39:ILE:HA | 1:A:40:SER:HB3 | 15 | 0.6 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE22 | 6 | 0.6 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE22 | 6 | 0.6 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE22 | 6 | 0.6 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB1 | 3 | 0.6 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB2 | 3 | 0.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB3 | 3 | 0.6 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 16 | 0.59 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 16 | 0.59 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 16 | 0.59 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 16 | 0.59 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 16 | 0.59 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 16 | 0.59 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB2 | 6 | 0.59 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB2 | 6 | 0.59 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB2 | 6 | 0.59 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD11 | 7 | 0.59 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD12 | 7 | 0.59 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD13 | 7 | 0.59 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD21 | 12 | 0.59 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD22 | 12 | 0.59 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD23 | 12 | 0.59 |
| (1,608) | 1:A:98:GLN:HA | 1:A:111:LYS:HD2 | 11 | 0.59 |
| (1,521) | 1:A:68:MET:HG3 | 1:A:69:MET:H | 14 | 0.59 |
| (1,2198) | 1:A:9:HIS:HB3 | 1:A:9:HIS:HD2 | 12 | 0.59 |
| (1,2198) | 1:A:9:HIS:HB3 | 1:A:9:HIS:HD2 | 15 | 0.59 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 15 | 0.59 |
| (1,2116) | 1:A:105:LYS:H | 1:A:105:LYS:HG3 | 7 | 0.59 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 15 | 0.59 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 15 | 0.59 |
| (1,2021) | 1:A:107:THR:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 15 | 0.59 |
| (1,1976) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ASN:H | 19 | 0.59 |
| (1,1869) | 1:A:84:GLU:H | 1:A:85:MET:HG2 | 7 | 0.59 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 6 | 0.59 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 6 | 0.59 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 6 | 0.59 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD11 | 17 | 0.59 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD12 | 17 | 0.59 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD13 | 17 | 0.59 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:51:GLY:HA2 | 6 | 0.59 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:51:GLY:HA2 | 6 | 0.59 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:51:GLY:HA2 | 6 | 0.59 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:51:GLY:HA2 | 7 | 0.59 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:51:GLY:HA2 | 7 | 0.59 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:51:GLY:HA2 | 7 | 0.59 |
| (1,1259) | 1:A:39:ILE:HA | 1:A:40:SER:HB3 | 5 | 0.59 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE22 | 4 | 0.59 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE22 | 4 | 0.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE22 | 4 | 0.59 |
| (1,117) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 10 | 0.59 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG21 | 2 | 0.59 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG22 | 2 | 0.59 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG23 | 2 | 0.59 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD11 | 1:A:116:MET:H | 12 | 0.58 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD12 | 1:A:116:MET:H | 12 | 0.58 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD13 | 1:A:116:MET:H | 12 | 0.58 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD11 | 19 | 0.58 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD12 | 19 | 0.58 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD13 | 19 | 0.58 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 19 | 0.58 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 19 | 0.58 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 19 | 0.58 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD21 | 1:A:109:THR:H | 2 | 0.58 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD22 | 1:A:109:THR:H | 2 | 0.58 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD23 | 1:A:109:THR:H | 2 | 0.58 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 11 | 0.58 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 11 | 0.58 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 11 | 0.58 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD11 | 17 | 0.58 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD12 | 17 | 0.58 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD13 | 17 | 0.58 |
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 10 | 0.58 |
| (1,588) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:85:MET:H | 6 | 0.58 |
| (1,521) | 1:A:68:MET:HG3 | 1:A:69:MET:H | 15 | 0.58 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD11 | 4 | 0.58 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD12 | 4 | 0.58 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD13 | 4 | 0.58 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD11 | 4 | 0.58 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD12 | 4 | 0.58 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD13 | 4 | 0.58 |
| (1,216) | 1:A:114:ASP:HB2 | 1:A:115:LEU:HG | 4 | 0.58 |
| (1,1911) | 1:A:98:GLN:H | 1:A:98:GLN:HG3 | 2 | 0.58 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HB3 | 1 | 0.58 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HB3 | 1 | 0.58 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HB3 | 1 | 0.58 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HB3 | 1 | 0.58 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HB3 | 1 | 0.58 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HB3 | 1 | 0.58 |
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 19 | 0.58 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 18 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD11 | 5 | 0.58 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD12 | 5 | 0.58 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD13 | 5 | 0.58 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD11 | 5 | 0.58 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD12 | 5 | 0.58 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD13 | 5 | 0.58 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD11 | 5 | 0.58 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD12 | 5 | 0.58 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD13 | 5 | 0.58 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB1 | 2 | 0.58 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB2 | 2 | 0.58 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB3 | 2 | 0.58 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB1 | 2 | 0.58 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB2 | 2 | 0.58 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB3 | 2 | 0.58 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB1 | 2 | 0.58 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB2 | 2 | 0.58 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB3 | 2 | 0.58 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG21 | 5 | 0.58 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG22 | 5 | 0.58 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG23 | 5 | 0.58 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG21 | 17 | 0.58 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG22 | 17 | 0.58 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG23 | 17 | 0.58 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 15 | 0.58 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 15 | 0.58 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 15 | 0.58 |
| (1,1123) | 1:A:58:LEU:HG | 1:A:86:LEU:HD11 | 12 | 0.58 |
| (1,1123) | 1:A:58:LEU:HG | 1:A:86:LEU:HD12 | 12 | 0.58 |
| (1,1123) | 1:A:58:LEU:HG | 1:A:86:LEU:HD13 | 12 | 0.58 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 15 | 0.57 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 15 | 0.57 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 15 | 0.57 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB3 | 7 | 0.57 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB3 | 7 | 0.57 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB3 | 7 | 0.57 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB3 | 13 | 0.57 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB3 | 13 | 0.57 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB3 | 13 | 0.57 |
| (1,63) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 17 | 0.57 |
| (1,63) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 17 | 0.57 |
| (1,521) | 1:A:68:MET:HG3 | 1:A:69:MET:H | 2 | 0.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HB3 | 8 | 0.57 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HB3 | 8 | 0.57 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HB3 | 8 | 0.57 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HG2 | 6 | 0.57 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HG2 | 6 | 0.57 |
| (1,389) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HG2 | 6 | 0.57 |
| (1,380) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:52:LYS:HB2 | 9 | 0.57 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD11 | 12 | 0.57 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD12 | 12 | 0.57 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD13 | 12 | 0.57 |
| (1,277) | 1:A:44:CYS:HB2 | 1:A:45:ASN:HD22 | 19 | 0.57 |
| (1,230) | 1:A:70:CYS:HB3 | 1:A:76:ASN:H | 6 | 0.57 |
| (1,2140) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:106:GLN:HE22 | 17 | 0.57 |
| (1,2041) | 1:A:7:LEU:H | 1:A:8:GLN:HG3 | 5 | 0.57 |
| (1,1802) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:H | 3 | 0.57 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 19 | 0.57 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 19 | 0.57 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 19 | 0.57 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE1 | 1:A:117:ASN:HB3 | 9 | 0.57 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE2 | 1:A:117:ASN:HB3 | 9 | 0.57 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE3 | 1:A:117:ASN:HB3 | 9 | 0.57 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD11 | 11 | 0.57 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD12 | 11 | 0.57 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD13 | 11 | 0.57 |
| (1,1255) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HB3 | 8 | 0.57 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 9 | 0.56 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 9 | 0.56 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 9 | 0.56 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD11 | 1:A:116:MET:H | 5 | 0.56 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD12 | 1:A:116:MET:H | 5 | 0.56 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD13 | 1:A:116:MET:H | 5 | 0.56 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 2 | 0.56 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 2 | 0.56 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 2 | 0.56 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 2 | 0.56 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 2 | 0.56 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 2 | 0.56 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 7 | 0.56 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 7 | 0.56 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 7 | 0.56 |
| (1,605) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:8:GLN:HE22 | 18 | 0.56 |
| (1,537) | 1:A:65:MET:HG3 | 1:A:66:THR:H | 8 | 0.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,537) | 1:A:65:MET:HG3 | 1:A:66:THR:H | 10 | 0.56 |
| (1,527) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HG2 | 8 | 0.56 |
| (1,407) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:74:GLN:HE22 | 6 | 0.56 |
| (1,277) | 1:A:44:CYS:HB2 | 1:A:45:ASN:HD22 | 9 | 0.56 |
| (1,270) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:45:ASN:HD22 | 16 | 0.56 |
| (1,264) | 1:A:80:ASN:HB3 | 1:A:81:THR:HA | 10 | 0.56 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 9 | 0.56 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 16 | 0.56 |
| (1,2198) | 1:A:9:HIS:HB3 | 1:A:9:HIS:HD2 | 4 | 0.56 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 8 | 0.56 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD22 | 8 | 0.56 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD23 | 8 | 0.56 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 8 | 0.56 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 8 | 0.56 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 8 | 0.56 |
| (1,1976) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ASN:H | 7 | 0.56 |
| (1,1976) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ASN:H | 13 | 0.56 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 19 | 0.56 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD11 | 3 | 0.56 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD12 | 3 | 0.56 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD13 | 3 | 0.56 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD21 | 13 | 0.56 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD22 | 13 | 0.56 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD23 | 13 | 0.56 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 13 | 0.56 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 13 | 0.56 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 13 | 0.56 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 13 | 0.56 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 13 | 0.56 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 13 | 0.56 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 8 | 0.56 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 14 | 0.56 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG21 | 7 | 0.56 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG22 | 7 | 0.56 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG23 | 7 | 0.56 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HG2 | 15 | 0.56 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HG2 | 15 | 0.56 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HG2 | 15 | 0.56 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD11 | 1:A:116:MET:H | 15 | 0.55 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD12 | 1:A:116:MET:H | 15 | 0.55 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD13 | 1:A:116:MET:H | 15 | 0.55 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:82:ILE:H | 12 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:82:ILE:H | 12 | 0.55 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:82:ILE:H | 12 | 0.55 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 16 | 0.55 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 16 | 0.55 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 16 | 0.55 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 16 | 0.55 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 16 | 0.55 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 16 | 0.55 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 16 | 0.55 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 16 | 0.55 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 16 | 0.55 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD21 | 16 | 0.55 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD22 | 16 | 0.55 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD23 | 16 | 0.55 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD21 | 16 | 0.55 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD22 | 16 | 0.55 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD23 | 16 | 0.55 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD21 | 16 | 0.55 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD22 | 16 | 0.55 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD23 | 16 | 0.55 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 9 | 0.55 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 9 | 0.55 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 9 | 0.55 |
| (1,848) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:84:GLU:HB2 | 9 | 0.55 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD11 | 4 | 0.55 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD12 | 4 | 0.55 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD13 | 4 | 0.55 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 9 | 0.55 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 9 | 0.55 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 9 | 0.55 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 9 | 0.55 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 9 | 0.55 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 9 | 0.55 |
| (1,588) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:85:MET:H | 7 | 0.55 |
| (1,577) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HB3 | 15 | 0.55 |
| (1,537) | 1:A:65:MET:HG3 | 1:A:66:THR:H | 15 | 0.55 |
| (1,521) | 1:A:68:MET:HG3 | 1:A:69:MET:H | 13 | 0.55 |
| (1,432) | 1:A:92:VAL:HB | 1:A:99:LEU:HD21 | 12 | 0.55 |
| (1,432) | 1:A:92:VAL:HB | 1:A:99:LEU:HD22 | 12 | 0.55 |
| (1,432) | 1:A:92:VAL:HB | 1:A:99:LEU:HD23 | 12 | 0.55 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 7 | 0.55 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 9 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG21 | 4 | 0.55 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG22 | 4 | 0.55 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG23 | 4 | 0.55 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 14 | 0.55 |
| (1,196) | 1:A:33:PHE:HB2 | 1:A:37:MET:HA | 11 | 0.55 |
| (1,1724) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:106:GLN:HE22 | 5 | 0.55 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD11 | 9 | 0.55 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD12 | 9 | 0.55 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD13 | 9 | 0.55 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD11 | 9 | 0.55 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD12 | 9 | 0.55 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD13 | 9 | 0.55 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD11 | 9 | 0.55 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD12 | 9 | 0.55 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD13 | 9 | 0.55 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD11 | 13 | 0.55 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD12 | 13 | 0.55 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD13 | 13 | 0.55 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD11 | 13 | 0.55 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD12 | 13 | 0.55 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD13 | 13 | 0.55 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD11 | 13 | 0.55 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD12 | 13 | 0.55 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD13 | 13 | 0.55 |
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 5 | 0.55 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE1 | 1:A:83:SER:HB3 | 9 | 0.55 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE2 | 1:A:83:SER:HB3 | 9 | 0.55 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE3 | 1:A:83:SER:HB3 | 9 | 0.55 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:51:GLY:HA2 | 9 | 0.55 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:51:GLY:HA2 | 9 | 0.55 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:51:GLY:HA2 | 9 | 0.55 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:51:GLY:HA2 | 17 | 0.55 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:51:GLY:HA2 | 17 | 0.55 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:51:GLY:HA2 | 17 | 0.55 |
| (1,1255) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HB3 | 14 | 0.55 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB1 | 1 | 0.55 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB2 | 1 | 0.55 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB3 | 1 | 0.55 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB1 | 1 | 0.55 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB2 | 1 | 0.55 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB3 | 1 | 0.55 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB1 | 1 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB2 | 1 | 0.55 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB3 | 1 | 0.55 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:H | 5 | 0.55 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:H | 5 | 0.55 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:H | 5 | 0.55 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD11 | 1:A:116:MET:H | 19 | 0.54 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD12 | 1:A:116:MET:H | 19 | 0.54 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD13 | 1:A:116:MET:H | 19 | 0.54 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 6 | 0.54 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 6 | 0.54 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 6 | 0.54 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 6 | 0.54 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 6 | 0.54 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 6 | 0.54 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 6 | 0.54 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 6 | 0.54 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 6 | 0.54 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD21 | 6 | 0.54 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD22 | 6 | 0.54 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD23 | 6 | 0.54 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD21 | 6 | 0.54 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD22 | 6 | 0.54 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD23 | 6 | 0.54 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD21 | 6 | 0.54 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD22 | 6 | 0.54 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD23 | 6 | 0.54 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 9 | 0.54 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 9 | 0.54 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 9 | 0.54 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 9 | 0.54 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 9 | 0.54 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 9 | 0.54 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB2 | 17 | 0.54 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB2 | 17 | 0.54 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB2 | 17 | 0.54 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 6 | 0.54 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 6 | 0.54 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 6 | 0.54 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 11 | 0.54 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 11 | 0.54 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 11 | 0.54 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 4 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 4 | 0.54 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 4 | 0.54 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 8 | 0.54 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 8 | 0.54 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 8 | 0.54 |
| (1,828) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:101:LEU:HD21 | 13 | 0.54 |
| (1,828) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:101:LEU:HD22 | 13 | 0.54 |
| (1,828) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:101:LEU:HD23 | 13 | 0.54 |
| (1,817) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HD11 | 5 | 0.54 |
| (1,817) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HD12 | 5 | 0.54 |
| (1,817) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HD13 | 5 | 0.54 |
| (1,794) | 1:A:70:CYS:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 3 | 0.54 |
| (1,794) | 1:A:70:CYS:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 3 | 0.54 |
| (1,794) | 1:A:70:CYS:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 3 | 0.54 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 0.54 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 0.54 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 0.54 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 0.54 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 0.54 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 0.54 |
| (1,688) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:29:PRO:HB2 | 6 | 0.54 |
| (1,688) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:29:PRO:HB2 | 6 | 0.54 |
| (1,688) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:29:PRO:HB2 | 6 | 0.54 |
| (1,608) | 1:A:98:GLN:HA | 1:A:111:LYS:HD2 | 4 | 0.54 |
| (1,577) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HB3 | 18 | 0.54 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 0.54 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 0.54 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 0.54 |
| (1,405) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:78:LEU:HD21 | 11 | 0.54 |
| (1,405) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:78:LEU:HD22 | 11 | 0.54 |
| (1,405) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:78:LEU:HD23 | 11 | 0.54 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HB3 | 11 | 0.54 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HB3 | 11 | 0.54 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HB3 | 11 | 0.54 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 6 | 0.54 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 17 | 0.54 |
| (1,354) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG3 | 13 | 0.54 |
| (1,2198) | 1:A:9:HIS:HB3 | 1:A:9:HIS:HD2 | 19 | 0.54 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD11 | 16 | 0.54 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD12 | 16 | 0.54 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD13 | 16 | 0.54 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD11 | 16 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD12 | 16 | 0.54 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD13 | 16 | 0.54 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 8 | 0.54 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 10 | 0.54 |
| (1,2041) | 1:A:7:LEU:H | 1:A:8:GLN:HG3 | 19 | 0.54 |
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 15 | 0.54 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 2 | 0.54 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD11 | 13 | 0.54 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD12 | 13 | 0.54 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD13 | 13 | 0.54 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:51:GLY:HA2 | 19 | 0.54 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 19 | 0.54 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 19 | 0.54 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 10 | 0.54 |
| (1,1255) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HB3 | 5 | 0.54 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE22 | 17 | 0.54 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE22 | 17 | 0.54 |
| (1,1228) | 1:A:17:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE22 | 17 | 0.54 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG21 | 16 | 0.54 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG22 | 16 | 0.54 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG23 | 16 | 0.54 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB1 | 19 | 0.54 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB2 | 19 | 0.54 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB3 | 19 | 0.54 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 11 | 0.53 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 11 | 0.53 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 11 | 0.53 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 17 | 0.53 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 17 | 0.53 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 17 | 0.53 |
| (1,661) | 1:A:98:GLN:HG3 | 1:A:109:THR:HB | 9 | 0.53 |
| (1,595) | 1:A:77:GLU:HB2 | 1:A:78:LEU:H | 14 | 0.53 |
| (1,432) | 1:A:92:VAL:HB | 1:A:99:LEU:HD21 | 14 | 0.53 |
| (1,432) | 1:A:92:VAL:HB | 1:A:99:LEU:HD22 | 14 | 0.53 |
| (1,432) | 1:A:92:VAL:HB | 1:A:99:LEU:HD23 | 14 | 0.53 |
| (1,1940) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HG3 | 15 | 0.53 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 9 | 0.53 |
| (1,165) | 1:A:45:ASN:HB2 | 1:A:67:ARG:HA | 9 | 0.53 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 13 | 0.53 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 13 | 0.53 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 13 | 0.53 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:51:GLY:HA2 | 17 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 17 | 0.53 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 17 | 0.53 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD21 | 2 | 0.53 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD22 | 2 | 0.53 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD23 | 2 | 0.53 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD21 | 2 | 0.53 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD22 | 2 | 0.53 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD23 | 2 | 0.53 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD21 | 2 | 0.53 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD22 | 2 | 0.53 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD23 | 2 | 0.53 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 4 | 0.53 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 4 | 0.53 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 4 | 0.53 |
| (1,1254) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HG2 | 15 | 0.53 |
| (1,1254) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HG2 | 18 | 0.53 |
| (1,1101) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:108:LEU:HA | 3 | 0.53 |
| (1,1101) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:108:LEU:HA | 3 | 0.53 |
| (1,1101) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:108:LEU:HA | 3 | 0.53 |
| (1,104) | 1:A:7:LEU:HB2 | 1:A:8:GLN:HG3 | 16 | 0.53 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 2 | 0.52 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 2 | 0.52 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 2 | 0.52 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 10 | 0.52 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 10 | 0.52 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 10 | 0.52 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 8 | 0.52 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 8 | 0.52 |
| (1,996) | 1:A:58:LEU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 8 | 0.52 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 9 | 0.52 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 9 | 0.52 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 9 | 0.52 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 10 | 0.52 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 10 | 0.52 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 10 | 0.52 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 14 | 0.52 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 14 | 0.52 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 14 | 0.52 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 14 | 0.52 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 14 | 0.52 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 14 | 0.52 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 4 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD12 | 4 | 0.52 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD13 | 4 | 0.52 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD11 | 4 | 0.52 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD12 | 4 | 0.52 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD13 | 4 | 0.52 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD11 | 4 | 0.52 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD12 | 4 | 0.52 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD13 | 4 | 0.52 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD11 | 4 | 0.52 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD12 | 4 | 0.52 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD13 | 4 | 0.52 |
| (1,616) | 1:A:31:ILE:HG12 | 1:A:47:PHE:HZ | 10 | 0.52 |
| (1,537) | 1:A:65:MET:HG3 | 1:A:66:THR:H | 6 | 0.52 |
| (1,432) | 1:A:92:VAL:HB | 1:A:99:LEU:HD21 | 6 | 0.52 |
| (1,432) | 1:A:92:VAL:HB | 1:A:99:LEU:HD22 | 6 | 0.52 |
| (1,432) | 1:A:92:VAL:HB | 1:A:99:LEU:HD23 | 6 | 0.52 |
| (1,407) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:74:GLN:HE22 | 3 | 0.52 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 1 | 0.52 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 16 | 0.52 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG21 | 14 | 0.52 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG22 | 14 | 0.52 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG23 | 14 | 0.52 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD11 | 6 | 0.52 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD12 | 6 | 0.52 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD13 | 6 | 0.52 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 4 | 0.52 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD22 | 4 | 0.52 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD23 | 4 | 0.52 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 4 | 0.52 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 4 | 0.52 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 4 | 0.52 |
| (1,2158) | 1:A:48:SER:HB2 | 1:A:49:GLY:H | 8 | 0.52 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 16 | 0.52 |
| (1,1917) | 1:A:24:SER:HB2 | 1:A:26:LYS:H | 13 | 0.52 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HB3 | 5 | 0.52 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HB3 | 5 | 0.52 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HB3 | 5 | 0.52 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HB3 | 5 | 0.52 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HB3 | 5 | 0.52 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HB3 | 5 | 0.52 |
| (1,1591) | 1:A:11:ARG:HA | 1:A:32:SER:HB2 | 4 | 0.52 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE1 | 1:A:83:SER:HB3 | 6 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE2 | 1:A:83:SER:HB3 | 6 | 0.52 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE3 | 1:A:83:SER:HB3 | 6 | 0.52 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD21 | 8 | 0.52 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD22 | 8 | 0.52 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD23 | 8 | 0.52 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD21 | 8 | 0.52 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD22 | 8 | 0.52 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD23 | 8 | 0.52 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD21 | 8 | 0.52 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD22 | 8 | 0.52 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD23 | 8 | 0.52 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 2 | 0.52 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 2 | 0.52 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 2 | 0.52 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:51:GLY:HA2 | 12 | 0.52 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:51:GLY:HA2 | 12 | 0.52 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:51:GLY:HA2 | 12 | 0.52 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB1 | 6 | 0.52 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB2 | 6 | 0.52 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB3 | 6 | 0.52 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB1 | 6 | 0.52 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB2 | 6 | 0.52 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB3 | 6 | 0.52 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB1 | 6 | 0.52 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB2 | 6 | 0.52 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB3 | 6 | 0.52 |
| (1,1188) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:84:GLU:HB2 | 11 | 0.52 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB1 | 9 | 0.52 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB2 | 9 | 0.52 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB3 | 9 | 0.52 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB1 | 16 | 0.52 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB2 | 16 | 0.52 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB3 | 16 | 0.52 |
| (1,1117) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:89:GLY:HA2 | 12 | 0.52 |
| (1,1117) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:89:GLY:HA2 | 12 | 0.52 |
| (1,1117) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:89:GLY:HA2 | 12 | 0.52 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 4 | 0.51 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 4 | 0.51 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 4 | 0.51 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 12 | 0.51 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 12 | 0.51 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 12 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 12 | 0.51 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 12 | 0.51 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 12 | 0.51 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 13 | 0.51 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 13 | 0.51 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 13 | 0.51 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD11 | 12 | 0.51 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD12 | 12 | 0.51 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD13 | 12 | 0.51 |
| (1,605) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:8:GLN:HE22 | 8 | 0.51 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HB3 | 7 | 0.51 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HB3 | 7 | 0.51 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HB3 | 7 | 0.51 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 3 | 0.51 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD22 | 3 | 0.51 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD23 | 3 | 0.51 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 3 | 0.51 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 3 | 0.51 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 3 | 0.51 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD11 | 2 | 0.51 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD12 | 2 | 0.51 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD13 | 2 | 0.51 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD11 | 2 | 0.51 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD12 | 2 | 0.51 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD13 | 2 | 0.51 |
| (1,2116) | 1:A:105:LYS:H | 1:A:105:LYS:HG3 | 15 | 0.51 |
| (1,2016) | 1:A:106:GLN:HE22 | 1:A:107:THR:H | 7 | 0.51 |
| (1,1869) | 1:A:84:GLU:H | 1:A:85:MET:HG2 | 15 | 0.51 |
| (1,1802) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:H | 2 | 0.51 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HB3 | 2 | 0.51 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HB3 | 2 | 0.51 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HB3 | 2 | 0.51 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HB3 | 2 | 0.51 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HB3 | 2 | 0.51 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HB3 | 2 | 0.51 |
| (1,177) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:13:VAL:H | 8 | 0.51 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 14 | 0.51 |
| (1,1754) | 1:A:101:LEU:H | 1:A:108:LEU:HD11 | 12 | 0.51 |
| (1,1754) | 1:A:101:LEU:H | 1:A:108:LEU:HD12 | 12 | 0.51 |
| (1,1754) | 1:A:101:LEU:H | 1:A:108:LEU:HD13 | 12 | 0.51 |
| (1,1737) | 1:A:111:LYS:HD2 | 1:A:112:LEU:H | 10 | 0.51 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 8 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD11 | 19 | 0.51 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD12 | 19 | 0.51 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:108:LEU:HD13 | 19 | 0.51 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD11 | 19 | 0.51 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD12 | 19 | 0.51 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:108:LEU:HD13 | 19 | 0.51 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD11 | 19 | 0.51 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD12 | 19 | 0.51 |
| (1,1558) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:108:LEU:HD13 | 19 | 0.51 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD11 | 14 | 0.51 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD12 | 14 | 0.51 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD13 | 14 | 0.51 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 0.51 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 0.51 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 0.51 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 0.51 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 0.51 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 0.51 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 15 | 0.51 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 15 | 0.51 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 15 | 0.51 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD21 | 5 | 0.51 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD22 | 5 | 0.51 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD23 | 5 | 0.51 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD21 | 5 | 0.51 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD22 | 5 | 0.51 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD23 | 5 | 0.51 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD21 | 5 | 0.51 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD22 | 5 | 0.51 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD23 | 5 | 0.51 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 17 | 0.51 |
| (1,1278) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:HA | 7 | 0.51 |
| (1,1188) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:84:GLU:HB2 | 15 | 0.51 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG21 | 1 | 0.51 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG22 | 1 | 0.51 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG23 | 1 | 0.51 |
| (1,1097) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:109:THR:H | 6 | 0.51 |
| (1,1097) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:109:THR:H | 6 | 0.51 |
| (1,1097) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:109:THR:H | 6 | 0.51 |
| (1,1089) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HG21 | 9 | 0.51 |
| (1,1089) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HG22 | 9 | 0.51 |
| (1,1089) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HG23 | 9 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD11 | 8 | 0.51 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD12 | 8 | 0.51 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD13 | 8 | 0.51 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD11 | 8 | 0.51 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD12 | 8 | 0.51 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD13 | 8 | 0.51 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD11 | 8 | 0.51 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD12 | 8 | 0.51 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD13 | 8 | 0.51 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG21 | 9 | 0.51 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG22 | 9 | 0.51 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG23 | 9 | 0.51 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 13 | 0.5 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 13 | 0.5 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 13 | 0.5 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 9 | 0.5 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 9 | 0.5 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 9 | 0.5 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 14 | 0.5 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 14 | 0.5 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 14 | 0.5 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 15 | 0.5 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 15 | 0.5 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 15 | 0.5 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB3 | 15 | 0.5 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB3 | 15 | 0.5 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB3 | 15 | 0.5 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB3 | 17 | 0.5 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB3 | 17 | 0.5 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB3 | 17 | 0.5 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB3 | 19 | 0.5 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB3 | 19 | 0.5 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB3 | 19 | 0.5 |
| (1,623) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:12:PHE:HA | 7 | 0.5 |
| (1,588) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:85:MET:H | 9 | 0.5 |
| (1,521) | 1:A:68:MET:HG3 | 1:A:69:MET:H | 12 | 0.5 |
| (1,472) | 1:A:26:LYS:HB2 | 1:A:27:ASN:HD21 | 5 | 0.5 |
| (1,410) | 1:A:74:GLN:HG2 | 1:A:78:LEU:HD21 | 14 | 0.5 |
| (1,410) | 1:A:74:GLN:HG2 | 1:A:78:LEU:HD22 | 14 | 0.5 |
| (1,410) | 1:A:74:GLN:HG2 | 1:A:78:LEU:HD23 | 14 | 0.5 |
| (1,405) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:78:LEU:HD21 | 7 | 0.5 |
| (1,405) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:78:LEU:HD22 | 7 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,405) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:78:LEU:HD23 | 7 | 0.5 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 19 | 0.5 |
| (1,273) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HB2 | 3 | 0.5 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 13 | 0.5 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD22 | 13 | 0.5 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD23 | 13 | 0.5 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 13 | 0.5 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 13 | 0.5 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 13 | 0.5 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 3 | 0.5 |
| (1,2041) | 1:A:7:LEU:H | 1:A:8:GLN:HG3 | 17 | 0.5 |
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 6 | 0.5 |
| (1,177) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:13:VAL:H | 7 | 0.5 |
| (1,1711) | 1:A:39:ILE:H | 1:A:51:GLY:HA2 | 15 | 0.5 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:51:GLY:HA2 | 4 | 0.5 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 4 | 0.5 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 4 | 0.5 |
| (1,1254) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HG2 | 2 | 0.5 |
| (1,1254) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HG2 | 5 | 0.5 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:110:TYR:HB2 | 14 | 0.5 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:110:TYR:HB2 | 14 | 0.5 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:110:TYR:HB2 | 14 | 0.5 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 8 | 0.49 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 8 | 0.49 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 8 | 0.49 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 19 | 0.49 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 19 | 0.49 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 19 | 0.49 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD11 | 1:A:116:MET:H | 9 | 0.49 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD12 | 1:A:116:MET:H | 9 | 0.49 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD13 | 1:A:116:MET:H | 9 | 0.49 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 7 | 0.49 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 7 | 0.49 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 7 | 0.49 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD21 | 7 | 0.49 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD22 | 7 | 0.49 |
| (1,990) | 1:A:10:HIS:HB3 | 1:A:112:LEU:HD23 | 7 | 0.49 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 7 | 0.49 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 7 | 0.49 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 7 | 0.49 |
| (1,660) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HB | 9 | 0.49 |
| (1,577) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HB3 | 9 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,561) | 1:A:45:ASN:HA | 1:A:46:ARG:HB3 | 19 | 0.49 |
| (1,407) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:74:GLN:HE22 | 14 | 0.49 |
| (1,273) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HB2 | 5 | 0.49 |
| (1,273) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HB2 | 10 | 0.49 |
| (1,273) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HB2 | 13 | 0.49 |
| (1,263) | 1:A:80:ASN:HB3 | 1:A:81:THR:H | 10 | 0.49 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 2 | 0.49 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD11 | 19 | 0.49 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD12 | 19 | 0.49 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD13 | 19 | 0.49 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD11 | 19 | 0.49 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD12 | 19 | 0.49 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD13 | 19 | 0.49 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD11 | 7 | 0.49 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD12 | 7 | 0.49 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD13 | 7 | 0.49 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD11 | 7 | 0.49 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD12 | 7 | 0.49 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD13 | 7 | 0.49 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 2 | 0.49 |
| (1,2016) | 1:A:106:GLN:HE22 | 1:A:107:THR:H | 2 | 0.49 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD21 | 3 | 0.49 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD22 | 3 | 0.49 |
| (1,1634) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:58:LEU:HD23 | 3 | 0.49 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 1 | 0.49 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 1 | 0.49 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 1 | 0.49 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 15 | 0.49 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 15 | 0.49 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 15 | 0.49 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 15 | 0.49 |
| (1,1254) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HG2 | 1 | 0.49 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 13 | 0.49 |
| (1,1132) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:14:LEU:H | 6 | 0.49 |
| (1,1132) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:14:LEU:H | 6 | 0.49 |
| (1,1132) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:14:LEU:H | 6 | 0.49 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 8 | 0.49 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 8 | 0.49 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 8 | 0.49 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HG2 | 18 | 0.49 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HG2 | 18 | 0.49 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HG2 | 18 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG21 | 15 | 0.49 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG22 | 15 | 0.49 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG23 | 15 | 0.49 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 15 | 0.48 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 15 | 0.48 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 15 | 0.48 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB2 | 10 | 0.48 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB2 | 10 | 0.48 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB2 | 10 | 0.48 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB2 | 13 | 0.48 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB2 | 13 | 0.48 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB2 | 13 | 0.48 |
| (1,880) | 1:A:98:GLN:HA | 1:A:111:LYS:HG3 | 12 | 0.48 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB3 | 12 | 0.48 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB3 | 12 | 0.48 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB3 | 12 | 0.48 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 3 | 0.48 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD12 | 3 | 0.48 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD13 | 3 | 0.48 |
| (1,8) | 1:A:61:LYS:HG2 | 1:A:62:GLY:HA3 | 18 | 0.48 |
| (1,8) | 1:A:61:LYS:HG3 | 1:A:62:GLY:HA3 | 18 | 0.48 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 15 | 0.48 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 15 | 0.48 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 15 | 0.48 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 15 | 0.48 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 15 | 0.48 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 15 | 0.48 |
| (1,692) | 1:A:14:LEU:HD21 | 1:A:29:PRO:HA | 6 | 0.48 |
| (1,692) | 1:A:14:LEU:HD22 | 1:A:29:PRO:HA | 6 | 0.48 |
| (1,692) | 1:A:14:LEU:HD23 | 1:A:29:PRO:HA | 6 | 0.48 |
| (1,561) | 1:A:45:ASN:HA | 1:A:46:ARG:HB3 | 6 | 0.48 |
| (1,521) | 1:A:68:MET:HG3 | 1:A:69:MET:H | 1 | 0.48 |
| (1,515) | 1:A:73:PRO:HB3 | 1:A:74:GLN:H | 18 | 0.48 |
| (1,273) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HB2 | 4 | 0.48 |
| (1,273) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HB2 | 12 | 0.48 |
| (1,273) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HB2 | 17 | 0.48 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 18 | 0.48 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 7 | 0.48 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 19 | 0.48 |
| (1,2098) | 1:A:72:ASN:HD21 | 1:A:74:GLN:HB2 | 9 | 0.48 |
| (1,1711) | 1:A:39:ILE:H | 1:A:51:GLY:HA2 | 13 | 0.48 |
| (1,158) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:46:ARG:H | 5 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,158) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:46:ARG:H | 8 | 0.48 |
| (1,158) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:46:ARG:H | 10 | 0.48 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:51:GLY:HA2 | 1 | 0.48 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:51:GLY:HA2 | 1 | 0.48 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:51:GLY:HA2 | 1 | 0.48 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB1 | 5 | 0.48 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB2 | 5 | 0.48 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:113:ALA:HB3 | 5 | 0.48 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB1 | 5 | 0.48 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB2 | 5 | 0.48 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:113:ALA:HB3 | 5 | 0.48 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB1 | 5 | 0.48 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB2 | 5 | 0.48 |
| (1,1216) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:113:ALA:HB3 | 5 | 0.48 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:H | 11 | 0.48 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:H | 11 | 0.48 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:H | 11 | 0.48 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB1 | 11 | 0.48 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB2 | 11 | 0.48 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB3 | 11 | 0.48 |
| (1,1097) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:109:THR:H | 17 | 0.48 |
| (1,1097) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:109:THR:H | 17 | 0.48 |
| (1,1097) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:109:THR:H | 17 | 0.48 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG21 | 2 | 0.48 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG22 | 2 | 0.48 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG23 | 2 | 0.48 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 4 | 0.48 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 4 | 0.48 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 4 | 0.48 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 4 | 0.47 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 4 | 0.47 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 4 | 0.47 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 4 | 0.47 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 4 | 0.47 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 4 | 0.47 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 4 | 0.47 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 4 | 0.47 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 4 | 0.47 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD21 | 4 | 0.47 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD22 | 4 | 0.47 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD23 | 4 | 0.47 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD21 | 4 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD22 | 4 | 0.47 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD23 | 4 | 0.47 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD21 | 4 | 0.47 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD22 | 4 | 0.47 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD23 | 4 | 0.47 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 12 | 0.47 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 12 | 0.47 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 12 | 0.47 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB2 | 15 | 0.47 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB2 | 15 | 0.47 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB2 | 15 | 0.47 |
| (1,880) | 1:A:98:GLN:HA | 1:A:111:LYS:HG3 | 4 | 0.47 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:108:LEU:HD21 | 12 | 0.47 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:108:LEU:HD22 | 12 | 0.47 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:108:LEU:HD23 | 12 | 0.47 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:108:LEU:HD21 | 12 | 0.47 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:108:LEU:HD22 | 12 | 0.47 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:108:LEU:HD23 | 12 | 0.47 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:108:LEU:HD21 | 12 | 0.47 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:108:LEU:HD22 | 12 | 0.47 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:108:LEU:HD23 | 12 | 0.47 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD21 | 9 | 0.47 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD22 | 9 | 0.47 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD23 | 9 | 0.47 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD21 | 17 | 0.47 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD22 | 17 | 0.47 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD23 | 17 | 0.47 |
| (1,595) | 1:A:77:GLU:HB2 | 1:A:78:LEU:H | 10 | 0.47 |
| (1,410) | 1:A:74:GLN:HG2 | 1:A:78:LEU:HD21 | 9 | 0.47 |
| (1,410) | 1:A:74:GLN:HG2 | 1:A:78:LEU:HD22 | 9 | 0.47 |
| (1,410) | 1:A:74:GLN:HG2 | 1:A:78:LEU:HD23 | 9 | 0.47 |
| (1,380) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:52:LYS:HB2 | 11 | 0.47 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 2 | 0.47 |
| (1,360) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:112:LEU:H | 3 | 0.47 |
| (1,345) | 1:A:84:GLU:HG2 | 1:A:85:MET:H | 17 | 0.47 |
| (1,273) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HB2 | 9 | 0.47 |
| (1,273) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HB2 | 15 | 0.47 |
| (1,273) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HB2 | 19 | 0.47 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD11 | 15 | 0.47 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD12 | 15 | 0.47 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD13 | 15 | 0.47 |
| (1,2141) | 1:A:106:GLN:HE21 | 1:A:108:LEU:HD21 | 9 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2141) | 1:A:106:GLN:HE21 | 1:A:108:LEU:HD22 | 9 | 0.47 |
| (1,2141) | 1:A:106:GLN:HE21 | 1:A:108:LEU:HD23 | 9 | 0.47 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 12 | 0.47 |
| (1,2098) | 1:A:72:ASN:HD21 | 1:A:74:GLN:HB2 | 6 | 0.47 |
| (1,1940) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HG3 | 12 | 0.47 |
| (1,1843) | 1:A:23:THR:H | 1:A:74:GLN:HE21 | 18 | 0.47 |
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 10 | 0.47 |
| (1,1792) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 17 | 0.47 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 3 | 0.47 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 3 | 0.47 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 3 | 0.47 |
| (1,1711) | 1:A:39:ILE:H | 1:A:51:GLY:HA2 | 4 | 0.47 |
| (1,1691) | 1:A:98:GLN:HB2 | 1:A:99:LEU:H | 9 | 0.47 |
| (1,1686) | 1:A:111:LYS:HD2 | 1:A:113:ALA:H | 10 | 0.47 |
| (1,158) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:46:ARG:H | 17 | 0.47 |
| (1,1102) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HD11 | 6 | 0.47 |
| (1,1102) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HD12 | 6 | 0.47 |
| (1,1102) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HD13 | 6 | 0.47 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:93:ASP:H | 9 | 0.47 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:93:ASP:H | 9 | 0.47 |
| (1,1038) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:93:ASP:H | 9 | 0.47 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.46 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.46 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.46 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.46 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.46 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.46 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.46 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.46 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.46 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.46 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.46 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.46 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.46 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.46 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.46 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.46 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.46 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.46 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 17 | 0.46 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 17 | 0.46 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 17 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB2 | 7 | 0.46 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB2 | 7 | 0.46 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB2 | 7 | 0.46 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB2 | 12 | 0.46 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB2 | 12 | 0.46 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB2 | 12 | 0.46 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 5 | 0.46 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 5 | 0.46 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 5 | 0.46 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:81:THR:HB | 8 | 0.46 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:81:THR:HB | 8 | 0.46 |
| (1,771) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:81:THR:HB | 8 | 0.46 |
| (1,762) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:67:ARG:HG3 | 14 | 0.46 |
| (1,698) | 1:A:42:SER:HB2 | 1:A:46:ARG:HG3 | 18 | 0.46 |
| (1,638) | 1:A:26:LYS:HA | 1:A:26:LYS:HD3 | 8 | 0.46 |
| (1,605) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:8:GLN:HE22 | 1 | 0.46 |
| (1,605) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:8:GLN:HE22 | 2 | 0.46 |
| (1,605) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:8:GLN:HE22 | 3 | 0.46 |
| (1,605) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:8:GLN:HE22 | 9 | 0.46 |
| (1,273) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HB2 | 7 | 0.46 |
| (1,1865) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HB2 | 19 | 0.46 |
| (1,158) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:46:ARG:H | 4 | 0.46 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE1 | 1:A:83:SER:HB3 | 13 | 0.46 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE2 | 1:A:83:SER:HB3 | 13 | 0.46 |
| (1,1364) | 1:A:65:MET:HE3 | 1:A:83:SER:HB3 | 13 | 0.46 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE1 | 14 | 0.46 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE2 | 14 | 0.46 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE3 | 14 | 0.46 |
| (1,1278) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:HA | 3 | 0.46 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 8 | 0.46 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 8 | 0.46 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 8 | 0.46 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 5 | 0.45 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 5 | 0.45 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 5 | 0.45 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 4 | 0.45 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 4 | 0.45 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 4 | 0.45 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD21 | 1:A:59:THR:H | 3 | 0.45 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD22 | 1:A:59:THR:H | 3 | 0.45 |
| (1,957) | 1:A:58:LEU:HD23 | 1:A:59:THR:H | 3 | 0.45 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 4 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 4 | 0.45 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 4 | 0.45 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB2 | 9 | 0.45 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB2 | 9 | 0.45 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB2 | 9 | 0.45 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 12 | 0.45 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 12 | 0.45 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 12 | 0.45 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 4 | 0.45 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 4 | 0.45 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 4 | 0.45 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 0.45 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 0.45 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 0.45 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 2 | 0.45 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 2 | 0.45 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 2 | 0.45 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 5 | 0.45 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 5 | 0.45 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 5 | 0.45 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 5 | 0.45 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 5 | 0.45 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 5 | 0.45 |
| (1,590) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:105:LYS:HE2 | 6 | 0.45 |
| (1,590) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:105:LYS:HE3 | 6 | 0.45 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HB2 | 11 | 0.45 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HB2 | 11 | 0.45 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HB2 | 11 | 0.45 |
| (1,273) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HB2 | 18 | 0.45 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD11 | 17 | 0.45 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD12 | 17 | 0.45 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD13 | 17 | 0.45 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB2 | 1:A:75:LEU:HB3 | 19 | 0.45 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB3 | 1:A:75:LEU:HB3 | 19 | 0.45 |
| (1,216) | 1:A:114:ASP:HB2 | 1:A:115:LEU:HG | 1 | 0.45 |
| (1,2016) | 1:A:106:GLN:HE22 | 1:A:107:THR:H | 5 | 0.45 |
| (1,1920) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:45:ASN:HD22 | 3 | 0.45 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HB3 | 4 | 0.45 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HB3 | 4 | 0.45 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HB3 | 4 | 0.45 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HB3 | 4 | 0.45 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HB3 | 4 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HB3 | 4 | 0.45 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:98:GLN:HA | 18 | 0.45 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:98:GLN:HA | 18 | 0.45 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:98:GLN:HA | 18 | 0.45 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD21 | 9 | 0.45 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD22 | 9 | 0.45 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD23 | 9 | 0.45 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 9 | 0.45 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 9 | 0.45 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 9 | 0.45 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 9 | 0.45 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 9 | 0.45 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 9 | 0.45 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD11 | 6 | 0.45 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD12 | 6 | 0.45 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD13 | 6 | 0.45 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD11 | 6 | 0.45 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD12 | 6 | 0.45 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD13 | 6 | 0.45 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD11 | 6 | 0.45 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD12 | 6 | 0.45 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD13 | 6 | 0.45 |
| (1,1255) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HB3 | 7 | 0.45 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 4 | 0.45 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB1 | 1:A:86:LEU:HB2 | 13 | 0.45 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HB2 | 13 | 0.45 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB3 | 1:A:86:LEU:HB2 | 13 | 0.45 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD11 | 1:A:116:MET:H | 3 | 0.44 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD12 | 1:A:116:MET:H | 3 | 0.44 |
| (1,993) | 1:A:115:LEU:HD13 | 1:A:116:MET:H | 3 | 0.44 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 19 | 0.44 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 19 | 0.44 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 19 | 0.44 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 9 | 0.44 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 9 | 0.44 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 9 | 0.44 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB2 | 19 | 0.44 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB2 | 19 | 0.44 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB2 | 19 | 0.44 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 1 | 0.44 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD12 | 1 | 0.44 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD13 | 1 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,798) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:78:LEU:HD21 | 12 | 0.44 |
| (1,798) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:78:LEU:HD22 | 12 | 0.44 |
| (1,798) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:78:LEU:HD23 | 12 | 0.44 |
| (1,537) | 1:A:65:MET:HG3 | 1:A:66:THR:H | 13 | 0.44 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 5 | 0.44 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 5 | 0.44 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 5 | 0.44 |
| (1,432) | 1:A:92:VAL:HB | 1:A:99:LEU:HD21 | 11 | 0.44 |
| (1,432) | 1:A:92:VAL:HB | 1:A:99:LEU:HD22 | 11 | 0.44 |
| (1,432) | 1:A:92:VAL:HB | 1:A:99:LEU:HD23 | 11 | 0.44 |
| (1,410) | 1:A:74:GLN:HG2 | 1:A:78:LEU:HD21 | 12 | 0.44 |
| (1,410) | 1:A:74:GLN:HG2 | 1:A:78:LEU:HD22 | 12 | 0.44 |
| (1,410) | 1:A:74:GLN:HG2 | 1:A:78:LEU:HD23 | 12 | 0.44 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HB3 | 13 | 0.44 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HB3 | 13 | 0.44 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HB3 | 13 | 0.44 |
| (1,345) | 1:A:84:GLU:HG2 | 1:A:85:MET:H | 19 | 0.44 |
| (1,227) | 1:A:70:CYS:HB2 | 1:A:75:LEU:HB3 | 3 | 0.44 |
| (1,227) | 1:A:70:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HB3 | 3 | 0.44 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 12 | 0.44 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD22 | 12 | 0.44 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD23 | 12 | 0.44 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 12 | 0.44 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 12 | 0.44 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 12 | 0.44 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 6 | 0.44 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 11 | 0.44 |
| (1,1940) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HG3 | 19 | 0.44 |
| (1,1843) | 1:A:23:THR:H | 1:A:74:GLN:HE21 | 3 | 0.44 |
| (1,1843) | 1:A:23:THR:H | 1:A:74:GLN:HE21 | 16 | 0.44 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 2 | 0.44 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 2 | 0.44 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 2 | 0.44 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 12 | 0.44 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:110:TYR:HB2 | 4 | 0.44 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:110:TYR:HB2 | 4 | 0.44 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:110:TYR:HB2 | 4 | 0.44 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG21 | 6 | 0.44 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG22 | 6 | 0.44 |
| (1,1162) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:13:VAL:HG23 | 6 | 0.44 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB1 | 8 | 0.44 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB2 | 8 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB3 | 8 | 0.44 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB1 | 15 | 0.44 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB2 | 15 | 0.44 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB3 | 15 | 0.44 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:6:GLN:HE21 | 18 | 0.44 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:6:GLN:HE21 | 18 | 0.44 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:6:GLN:HE21 | 18 | 0.44 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 5 | 0.44 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 5 | 0.44 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 5 | 0.44 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 17 | 0.44 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 17 | 0.44 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 17 | 0.44 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD21 | 5 | 0.43 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD22 | 5 | 0.43 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HD23 | 5 | 0.43 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD21 | 5 | 0.43 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD22 | 5 | 0.43 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HD23 | 5 | 0.43 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD21 | 5 | 0.43 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD22 | 5 | 0.43 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HD23 | 5 | 0.43 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD21 | 5 | 0.43 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD22 | 5 | 0.43 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HD23 | 5 | 0.43 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD21 | 5 | 0.43 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD22 | 5 | 0.43 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HD23 | 5 | 0.43 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD21 | 5 | 0.43 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD22 | 5 | 0.43 |
| (1,964) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HD23 | 5 | 0.43 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:101:LEU:HG | 15 | 0.43 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:101:LEU:HG | 15 | 0.43 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:101:LEU:HG | 15 | 0.43 |
| (1,825) | 1:A:84:GLU:HA | 1:A:87:LYS:HG2 | 8 | 0.43 |
| (1,762) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:67:ARG:HG3 | 19 | 0.43 |
| (1,605) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:8:GLN:HE22 | 13 | 0.43 |
| (1,381) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HB2 | 12 | 0.43 |
| (1,310) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:111:LYS:HG3 | 3 | 0.43 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 7 | 0.43 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD22 | 7 | 0.43 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD23 | 7 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 7 | 0.43 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 7 | 0.43 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 7 | 0.43 |
| (1,216) | 1:A:114:ASP:HB2 | 1:A:115:LEU:HG | 14 | 0.43 |
| (1,216) | 1:A:114:ASP:HB2 | 1:A:115:LEU:HG | 19 | 0.43 |
| (1,1803) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:67:ARG:HA | 1 | 0.43 |
| (1,1803) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:67:ARG:HA | 11 | 0.43 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 13 | 0.43 |
| (1,1724) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:106:GLN:HE22 | 15 | 0.43 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 18 | 0.43 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 18 | 0.43 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 18 | 0.43 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:51:GLY:HA2 | 15 | 0.43 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:51:GLY:HA2 | 15 | 0.43 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:51:GLY:HA2 | 15 | 0.43 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 6 | 0.43 |
| (1,1278) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:HA | 14 | 0.43 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 17 | 0.43 |
| (1,1210) | 1:A:2:VAL:HA | 1:A:6:GLN:HE21 | 14 | 0.43 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB1 | 5 | 0.43 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB2 | 5 | 0.43 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB3 | 5 | 0.43 |
| (1,1081) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD21 | 2 | 0.43 |
| (1,1081) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD22 | 2 | 0.43 |
| (1,1081) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD23 | 2 | 0.43 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 19 | 0.42 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 19 | 0.42 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 19 | 0.42 |
| (1,661) | 1:A:98:GLN:HG3 | 1:A:109:THR:HB | 8 | 0.42 |
| (1,577) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HB3 | 4 | 0.42 |
| (1,577) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HB3 | 12 | 0.42 |
| (1,381) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HB2 | 6 | 0.42 |
| (1,359) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:111:LYS:HB2 | 7 | 0.42 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD11 | 3 | 0.42 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD12 | 3 | 0.42 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD13 | 3 | 0.42 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD11 | 14 | 0.42 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD12 | 14 | 0.42 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD13 | 14 | 0.42 |
| (1,224) | 1:A:44:CYS:H | 1:A:75:LEU:HB2 | 2 | 0.42 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 16 | 0.42 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD22 | 16 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD23 | 16 | 0.42 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 16 | 0.42 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 16 | 0.42 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 16 | 0.42 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD11 | 10 | 0.42 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD12 | 10 | 0.42 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD13 | 10 | 0.42 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD11 | 10 | 0.42 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD12 | 10 | 0.42 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD13 | 10 | 0.42 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 9 | 0.42 |
| (1,2130) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:7:LEU:HG | 16 | 0.42 |
| (1,2130) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:7:LEU:HG | 18 | 0.42 |
| (1,2016) | 1:A:106:GLN:HE22 | 1:A:107:THR:H | 13 | 0.42 |
| (1,1803) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:67:ARG:HA | 18 | 0.42 |
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 4 | 0.42 |
| (1,1754) | 1:A:101:LEU:H | 1:A:108:LEU:HD11 | 2 | 0.42 |
| (1,1754) | 1:A:101:LEU:H | 1:A:108:LEU:HD12 | 2 | 0.42 |
| (1,1754) | 1:A:101:LEU:H | 1:A:108:LEU:HD13 | 2 | 0.42 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE1 | 1:A:117:ASN:HB3 | 1 | 0.42 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE2 | 1:A:117:ASN:HB3 | 1 | 0.42 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE3 | 1:A:117:ASN:HB3 | 1 | 0.42 |
| (1,1254) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HG2 | 13 | 0.42 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:H | 17 | 0.42 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:H | 17 | 0.42 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:H | 17 | 0.42 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB1 | 2 | 0.42 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB2 | 2 | 0.42 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB3 | 2 | 0.42 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:29:PRO:HD3 | 13 | 0.42 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:29:PRO:HD3 | 13 | 0.42 |
| (1,1129) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:29:PRO:HD3 | 13 | 0.42 |
| (1,1081) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD21 | 9 | 0.42 |
| (1,1081) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD22 | 9 | 0.42 |
| (1,1081) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD23 | 9 | 0.42 |
| (1,1081) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD21 | 15 | 0.42 |
| (1,1081) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD22 | 15 | 0.42 |
| (1,1081) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD23 | 15 | 0.42 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB1 | 1:A:86:LEU:HB2 | 3 | 0.42 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HB2 | 3 | 0.42 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB3 | 1:A:86:LEU:HB2 | 3 | 0.42 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 17 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 17 | 0.41 |
| (1,999) | 1:A:92:VAL:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 17 | 0.41 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:82:ILE:H | 17 | 0.41 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:82:ILE:H | 17 | 0.41 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:82:ILE:H | 17 | 0.41 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 7 | 0.41 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 7 | 0.41 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 7 | 0.41 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 13 | 0.41 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 13 | 0.41 |
| (1,896) | 1:A:99:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 13 | 0.41 |
| (1,874) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:H | 17 | 0.41 |
| (1,874) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:H | 17 | 0.41 |
| (1,874) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:H | 17 | 0.41 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 1 | 0.41 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 1 | 0.41 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 1 | 0.41 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 6 | 0.41 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 6 | 0.41 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 6 | 0.41 |
| (1,605) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:8:GLN:HE22 | 6 | 0.41 |
| (1,444) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:53:LEU:H | 8 | 0.41 |
| (1,311) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:111:LYS:H | 10 | 0.41 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD11 | 18 | 0.41 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD12 | 18 | 0.41 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:94:LEU:HD13 | 18 | 0.41 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD11 | 18 | 0.41 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD12 | 18 | 0.41 |
| (1,2186) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:94:LEU:HD13 | 18 | 0.41 |
| (1,216) | 1:A:114:ASP:HB2 | 1:A:115:LEU:HG | 18 | 0.41 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 5 | 0.41 |
| (1,2068) | 1:A:18:ASN:HD21 | 1:A:106:GLN:HB3 | 17 | 0.41 |
| (1,2060) | 1:A:8:GLN:H | 1:A:8:GLN:HG3 | 10 | 0.41 |
| (1,1869) | 1:A:84:GLU:H | 1:A:85:MET:HG2 | 10 | 0.41 |
| (1,1803) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:67:ARG:HA | 14 | 0.41 |
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 5 | 0.41 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 16 | 0.41 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:51:GLY:HA2 | 12 | 0.41 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 12 | 0.41 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 12 | 0.41 |
| (1,1383) | 1:A:38:MET:HE1 | 1:A:48:SER:HB2 | 2 | 0.41 |
| (1,1383) | 1:A:38:MET:HE2 | 1:A:48:SER:HB2 | 2 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1383) | 1:A:38:MET:HE3 | 1:A:48:SER:HB2 | 2 | 0.41 |
| (1,1255) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HB3 | 3 | 0.41 |
| (1,1255) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HB3 | 9 | 0.41 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 7 | 0.41 |
| (1,1188) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:84:GLU:HB2 | 17 | 0.41 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:95:THR:H | 9 | 0.4 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:95:THR:H | 9 | 0.4 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:95:THR:H | 9 | 0.4 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 10 | 0.4 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 10 | 0.4 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 10 | 0.4 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 2 | 0.4 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD12 | 2 | 0.4 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD13 | 2 | 0.4 |
| (1,762) | 1:A:67:ARG:HA | 1:A:67:ARG:HG3 | 7 | 0.4 |
| (1,561) | 1:A:45:ASN:HA | 1:A:46:ARG:HB3 | 15 | 0.4 |
| (1,554) | 1:A:38:MET:H | 1:A:38:MET:HB2 | 7 | 0.4 |
| (1,515) | 1:A:73:PRO:HB3 | 1:A:74:GLN:H | 7 | 0.4 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HB3 | 4 | 0.4 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HB3 | 4 | 0.4 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HB3 | 4 | 0.4 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HB3 | 9 | 0.4 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HB3 | 9 | 0.4 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HB3 | 9 | 0.4 |
| (1,380) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:52:LYS:HB2 | 6 | 0.4 |
| (1,277) | 1:A:44:CYS:HB2 | 1:A:45:ASN:HD22 | 7 | 0.4 |
| (1,263) | 1:A:80:ASN:HB3 | 1:A:81:THR:H | 6 | 0.4 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 7 | 0.4 |
| (1,2041) | 1:A:7:LEU:H | 1:A:8:GLN:HG3 | 10 | 0.4 |
| (1,1976) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ASN:H | 10 | 0.4 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 17 | 0.4 |
| (1,1869) | 1:A:84:GLU:H | 1:A:85:MET:HG2 | 6 | 0.4 |
| (1,177) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:13:VAL:H | 16 | 0.4 |
| (1,158) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:46:ARG:H | 9 | 0.4 |
| (1,158) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:46:ARG:H | 15 | 0.4 |
| (1,158) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:46:ARG:H | 18 | 0.4 |
| (1,1399) | 1:A:33:PHE:HB2 | 1:A:37:MET:HE1 | 11 | 0.4 |
| (1,1399) | 1:A:33:PHE:HB2 | 1:A:37:MET:HE2 | 11 | 0.4 |
| (1,1399) | 1:A:33:PHE:HB2 | 1:A:37:MET:HE3 | 11 | 0.4 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:51:GLY:HA2 | 9 | 0.4 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 9 | 0.4 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 9 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE1 | 16 | 0.4 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE2 | 16 | 0.4 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE3 | 16 | 0.4 |
| (1,1255) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HB3 | 2 | 0.4 |
| (1,1254) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HG2 | 11 | 0.4 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:H | 2 | 0.4 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:H | 2 | 0.4 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:H | 2 | 0.4 |
| (1,1102) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HD11 | 3 | 0.4 |
| (1,1102) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HD12 | 3 | 0.4 |
| (1,1102) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HD13 | 3 | 0.4 |
| (1,1095) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:H | 6 | 0.4 |
| (1,1095) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:H | 6 | 0.4 |
| (1,1095) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:H | 6 | 0.4 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB1 | 1:A:86:LEU:HB2 | 1 | 0.4 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HB2 | 1 | 0.4 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB3 | 1:A:86:LEU:HB2 | 1 | 0.4 |
| (1,909) | 1:A:111:LYS:HG3 | 1:A:112:LEU:H | 8 | 0.39 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:101:LEU:HG | 9 | 0.39 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:101:LEU:HG | 9 | 0.39 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:101:LEU:HG | 9 | 0.39 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB2 | 14 | 0.39 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB2 | 14 | 0.39 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB2 | 14 | 0.39 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 6 | 0.39 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 6 | 0.39 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 6 | 0.39 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 6 | 0.39 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 6 | 0.39 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 6 | 0.39 |
| (1,827) | 1:A:101:LEU:HA | 1:A:101:LEU:HD21 | 3 | 0.39 |
| (1,827) | 1:A:101:LEU:HA | 1:A:101:LEU:HD22 | 3 | 0.39 |
| (1,827) | 1:A:101:LEU:HA | 1:A:101:LEU:HD23 | 3 | 0.39 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD11 | 3 | 0.39 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD12 | 3 | 0.39 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD13 | 3 | 0.39 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 10 | 0.39 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD12 | 10 | 0.39 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD13 | 10 | 0.39 |
| (1,697) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HG2 | 7 | 0.39 |
| (1,605) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:8:GLN:HE22 | 4 | 0.39 |
| (1,605) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:8:GLN:HE22 | 14 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,380) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:52:LYS:HB2 | 12 | 0.39 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD11 | 12 | 0.39 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD12 | 12 | 0.39 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD13 | 12 | 0.39 |
| (1,209) | 1:A:113:ALA:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 3 | 0.39 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 19 | 0.39 |
| (1,1792) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 7 | 0.39 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD11 | 2 | 0.39 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD12 | 2 | 0.39 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD13 | 2 | 0.39 |
| (1,158) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:46:ARG:H | 13 | 0.39 |
| (1,158) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:46:ARG:H | 14 | 0.39 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:51:GLY:HA2 | 6 | 0.39 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 6 | 0.39 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 6 | 0.39 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE1 | 1:A:117:ASN:HB3 | 4 | 0.39 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE2 | 1:A:117:ASN:HB3 | 4 | 0.39 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE3 | 1:A:117:ASN:HB3 | 4 | 0.39 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 12 | 0.39 |
| (1,118) | 1:A:47:PHE:HB2 | 1:A:63:LEU:HB3 | 13 | 0.39 |
| (1,1081) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD21 | 12 | 0.39 |
| (1,1081) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD22 | 12 | 0.39 |
| (1,1081) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD23 | 12 | 0.39 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 12 | 0.38 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 12 | 0.38 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 12 | 0.38 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:101:LEU:HG | 14 | 0.38 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:101:LEU:HG | 14 | 0.38 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:101:LEU:HG | 14 | 0.38 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD11 | 7 | 0.38 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD12 | 7 | 0.38 |
| (1,904) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:99:LEU:HD13 | 7 | 0.38 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:108:LEU:HD21 | 2 | 0.38 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:108:LEU:HD22 | 2 | 0.38 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:108:LEU:HD23 | 2 | 0.38 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:108:LEU:HD21 | 2 | 0.38 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:108:LEU:HD22 | 2 | 0.38 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:108:LEU:HD23 | 2 | 0.38 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:108:LEU:HD21 | 2 | 0.38 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:108:LEU:HD22 | 2 | 0.38 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:108:LEU:HD23 | 2 | 0.38 |
| (1,825) | 1:A:84:GLU:HA | 1:A:87:LYS:HG2 | 1 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 13 | 0.38 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD12 | 13 | 0.38 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD13 | 13 | 0.38 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 19 | 0.38 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD12 | 19 | 0.38 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD13 | 19 | 0.38 |
| (1,697) | 1:A:46:ARG:H | 1:A:46:ARG:HG2 | 17 | 0.38 |
| (1,577) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HB3 | 3 | 0.38 |
| (1,514) | 1:A:20:LYS:HA | 1:A:21:PRO:HB2 | 15 | 0.38 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HB3 | 1 | 0.38 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HB3 | 1 | 0.38 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HB3 | 1 | 0.38 |
| (1,380) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:52:LYS:HB2 | 3 | 0.38 |
| (1,354) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG3 | 10 | 0.38 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD11 | 7 | 0.38 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD12 | 7 | 0.38 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD13 | 7 | 0.38 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD21 | 7 | 0.38 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD22 | 7 | 0.38 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD23 | 7 | 0.38 |
| (1,230) | 1:A:70:CYS:HB3 | 1:A:76:ASN:H | 5 | 0.38 |
| (1,230) | 1:A:70:CYS:HB3 | 1:A:76:ASN:H | 13 | 0.38 |
| (1,230) | 1:A:70:CYS:HB3 | 1:A:76:ASN:H | 18 | 0.38 |
| (1,202) | 1:A:76:ASN:HA | 1:A:79:ASP:HB2 | 16 | 0.38 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 9 | 0.38 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 12 | 0.38 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 12 | 0.38 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 12 | 0.38 |
| (1,158) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:46:ARG:H | 7 | 0.38 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD11 | 6 | 0.38 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD12 | 6 | 0.38 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD13 | 6 | 0.38 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD11 | 6 | 0.38 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD12 | 6 | 0.38 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD13 | 6 | 0.38 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD11 | 6 | 0.38 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD12 | 6 | 0.38 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD13 | 6 | 0.38 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD11 | 12 | 0.38 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD12 | 12 | 0.38 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD13 | 12 | 0.38 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD11 | 12 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD12 | 12 | 0.38 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD13 | 12 | 0.38 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD11 | 12 | 0.38 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD12 | 12 | 0.38 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD13 | 12 | 0.38 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:98:GLN:HA | 7 | 0.38 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:98:GLN:HA | 7 | 0.38 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:98:GLN:HA | 7 | 0.38 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 5 | 0.38 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 5 | 0.38 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 5 | 0.38 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 6 | 0.38 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 6 | 0.38 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 6 | 0.38 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 3 | 0.38 |
| (1,1102) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HD11 | 14 | 0.38 |
| (1,1102) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HD12 | 14 | 0.38 |
| (1,1102) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HD13 | 14 | 0.38 |
| (1,1102) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HD11 | 17 | 0.38 |
| (1,1102) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HD12 | 17 | 0.38 |
| (1,1102) | 1:A:14:LEU:HA | 1:A:14:LEU:HD13 | 17 | 0.38 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:82:ILE:H | 14 | 0.37 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:82:ILE:H | 14 | 0.37 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:82:ILE:H | 14 | 0.37 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 6 | 0.37 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 6 | 0.37 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 6 | 0.37 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:95:THR:H | 13 | 0.37 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:95:THR:H | 13 | 0.37 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:95:THR:H | 13 | 0.37 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB2 | 11 | 0.37 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB2 | 11 | 0.37 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB2 | 11 | 0.37 |
| (1,827) | 1:A:101:LEU:HA | 1:A:101:LEU:HD21 | 13 | 0.37 |
| (1,827) | 1:A:101:LEU:HA | 1:A:101:LEU:HD22 | 13 | 0.37 |
| (1,827) | 1:A:101:LEU:HA | 1:A:101:LEU:HD23 | 13 | 0.37 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 9 | 0.37 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 9 | 0.37 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 9 | 0.37 |
| (1,698) | 1:A:42:SER:HB2 | 1:A:46:ARG:HG3 | 8 | 0.37 |
| (1,658) | 1:A:4:PRO:HG2 | 1:A:53:LEU:HG | 12 | 0.37 |
| (1,609) | 1:A:111:LYS:HG3 | 1:A:111:LYS:HD2 | 8 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,595) | 1:A:77:GLU:HB2 | 1:A:78:LEU:H | 15 | 0.37 |
| (1,527) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HG2 | 10 | 0.37 |
| (1,515) | 1:A:73:PRO:HB3 | 1:A:74:GLN:H | 9 | 0.37 |
| (1,469) | 1:A:25:ASP:HB2 | 1:A:26:LYS:HB2 | 9 | 0.37 |
| (1,469) | 1:A:25:ASP:HB3 | 1:A:26:LYS:HB2 | 9 | 0.37 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HB3 | 6 | 0.37 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HB3 | 6 | 0.37 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HB3 | 6 | 0.37 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HB2 | 6 | 0.37 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HB2 | 6 | 0.37 |
| (1,364) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HB2 | 6 | 0.37 |
| (1,264) | 1:A:80:ASN:HB3 | 1:A:81:THR:HA | 15 | 0.37 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD11 | 18 | 0.37 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD12 | 18 | 0.37 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD13 | 18 | 0.37 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD11 | 19 | 0.37 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD12 | 19 | 0.37 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD13 | 19 | 0.37 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB2 | 1:A:75:LEU:HB3 | 15 | 0.37 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB3 | 1:A:75:LEU:HB3 | 15 | 0.37 |
| (1,240) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HB2 | 15 | 0.37 |
| (1,2198) | 1:A:9:HIS:HB3 | 1:A:9:HIS:HD2 | 18 | 0.37 |
| (1,2116) | 1:A:105:LYS:H | 1:A:105:LYS:HG3 | 3 | 0.37 |
| (1,209) | 1:A:113:ALA:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 1 | 0.37 |
| (1,1976) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ASN:H | 5 | 0.37 |
| (1,1920) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:45:ASN:HD22 | 12 | 0.37 |
| (1,1869) | 1:A:84:GLU:H | 1:A:85:MET:HG2 | 13 | 0.37 |
| (1,1808) | 1:A:12:PHE:H | 1:A:32:SER:HB2 | 4 | 0.37 |
| (1,1803) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:67:ARG:HA | 15 | 0.37 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 14 | 0.37 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 14 | 0.37 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 14 | 0.37 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 4 | 0.37 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 15 | 0.37 |
| (1,1691) | 1:A:98:GLN:HB2 | 1:A:99:LEU:H | 12 | 0.37 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:98:GLN:HA | 6 | 0.37 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:98:GLN:HA | 6 | 0.37 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:98:GLN:HA | 6 | 0.37 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE1 | 1:A:117:ASN:HB3 | 2 | 0.37 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE2 | 1:A:117:ASN:HB3 | 2 | 0.37 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE3 | 1:A:117:ASN:HB3 | 2 | 0.37 |
| (1,1188) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:84:GLU:HB2 | 9 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1122) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD11 | 12 | 0.37 |
| (1,1122) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD12 | 12 | 0.37 |
| (1,1122) | 1:A:86:LEU:HA | 1:A:86:LEU:HD13 | 12 | 0.37 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB1 | 1:A:86:LEU:HB2 | 4 | 0.37 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HB2 | 4 | 0.37 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB3 | 1:A:86:LEU:HB2 | 4 | 0.37 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG21 | 8 | 0.37 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG22 | 8 | 0.37 |
| (1,1005) | 1:A:58:LEU:HB3 | 1:A:92:VAL:HG23 | 8 | 0.37 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:82:ILE:H | 4 | 0.36 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:82:ILE:H | 4 | 0.36 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:82:ILE:H | 4 | 0.36 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.36 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.36 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.36 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.36 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.36 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.36 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 1 | 0.36 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 1 | 0.36 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 1 | 0.36 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 18 | 0.36 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 18 | 0.36 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 18 | 0.36 |
| (1,909) | 1:A:111:LYS:HG3 | 1:A:112:LEU:H | 13 | 0.36 |
| (1,691) | 1:A:42:SER:HB2 | 1:A:46:ARG:HG2 | 7 | 0.36 |
| (1,661) | 1:A:98:GLN:HG3 | 1:A:109:THR:HB | 13 | 0.36 |
| (1,609) | 1:A:111:LYS:HG3 | 1:A:111:LYS:HD2 | 13 | 0.36 |
| (1,609) | 1:A:111:LYS:HG3 | 1:A:111:LYS:HD2 | 15 | 0.36 |
| (1,608) | 1:A:98:GLN:HA | 1:A:111:LYS:HD2 | 10 | 0.36 |
| (1,605) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:8:GLN:HE22 | 12 | 0.36 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD1 | 1:A:65:MET:HG3 | 17 | 0.36 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD2 | 1:A:65:MET:HG3 | 17 | 0.36 |
| (1,542) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:65:MET:HG3 | 12 | 0.36 |
| (1,542) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:65:MET:HG3 | 12 | 0.36 |
| (1,542) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:65:MET:HG3 | 12 | 0.36 |
| (1,527) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HG2 | 3 | 0.36 |
| (1,527) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HG2 | 16 | 0.36 |
| (1,514) | 1:A:20:LYS:HA | 1:A:21:PRO:HB2 | 8 | 0.36 |
| (1,380) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:52:LYS:HB2 | 18 | 0.36 |
| (1,310) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:111:LYS:HG3 | 16 | 0.36 |
| (1,273) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HB2 | 16 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD11 | 3 | 0.36 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD12 | 3 | 0.36 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD13 | 3 | 0.36 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD21 | 3 | 0.36 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD22 | 3 | 0.36 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD23 | 3 | 0.36 |
| (1,2136) | 1:A:22:VAL:HG11 | 1:A:74:GLN:HE21 | 19 | 0.36 |
| (1,2136) | 1:A:22:VAL:HG12 | 1:A:74:GLN:HE21 | 19 | 0.36 |
| (1,2136) | 1:A:22:VAL:HG13 | 1:A:74:GLN:HE21 | 19 | 0.36 |
| (1,1969) | 1:A:27:ASN:H | 1:A:27:ASN:HB2 | 17 | 0.36 |
| (1,1940) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HG3 | 7 | 0.36 |
| (1,1691) | 1:A:98:GLN:HB2 | 1:A:99:LEU:H | 5 | 0.36 |
| (1,1385) | 1:A:44:CYS:HA | 1:A:75:LEU:HB2 | 12 | 0.36 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 1 | 0.36 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 6 | 0.36 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 19 | 0.36 |
| (1,1188) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:84:GLU:HB2 | 14 | 0.36 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB1 | 4 | 0.36 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB2 | 4 | 0.36 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB3 | 4 | 0.36 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB1 | 1:A:86:LEU:HB2 | 7 | 0.36 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HB2 | 7 | 0.36 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB3 | 1:A:86:LEU:HB2 | 7 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD11 | 2 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD12 | 2 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD13 | 2 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD11 | 2 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD12 | 2 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD13 | 2 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD11 | 2 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD12 | 2 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD13 | 2 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD11 | 4 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD12 | 4 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD13 | 4 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD11 | 4 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD12 | 4 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD13 | 4 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD11 | 4 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD12 | 4 | 0.36 |
| (1,1046) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD13 | 4 | 0.36 |
| (1,1040) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:94:LEU:H | 15 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1040) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:94:LEU:H | 15 | 0.36 |
| (1,1040) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:94:LEU:H | 15 | 0.36 |
| (1,909) | 1:A:111:LYS:HG3 | 1:A:112:LEU:H | 4 | 0.35 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:101:LEU:HD21 | 3 | 0.35 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:101:LEU:HD22 | 3 | 0.35 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:101:LEU:HD23 | 3 | 0.35 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:101:LEU:HD21 | 3 | 0.35 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:101:LEU:HD22 | 3 | 0.35 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:101:LEU:HD23 | 3 | 0.35 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:101:LEU:HD21 | 3 | 0.35 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:101:LEU:HD22 | 3 | 0.35 |
| (1,907) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:101:LEU:HD23 | 3 | 0.35 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 9 | 0.35 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 9 | 0.35 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 9 | 0.35 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 9 | 0.35 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 9 | 0.35 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 9 | 0.35 |
| (1,561) | 1:A:45:ASN:HA | 1:A:46:ARG:HB3 | 14 | 0.35 |
| (1,514) | 1:A:20:LYS:HA | 1:A:21:PRO:HB2 | 2 | 0.35 |
| (1,380) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:52:LYS:HB2 | 16 | 0.35 |
| (1,356) | 1:A:5:GLU:HA | 1:A:8:GLN:HG3 | 17 | 0.35 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB2 | 1:A:75:LEU:HB3 | 12 | 0.35 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB3 | 1:A:75:LEU:HB3 | 12 | 0.35 |
| (1,240) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HB2 | 1 | 0.35 |
| (1,240) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HB2 | 7 | 0.35 |
| (1,240) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HB2 | 13 | 0.35 |
| (1,240) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HB2 | 17 | 0.35 |
| (1,2200) | 1:A:101:LEU:HD21 | 1:A:110:TYR:HE1 | 16 | 0.35 |
| (1,2200) | 1:A:101:LEU:HD21 | 1:A:110:TYR:HE2 | 16 | 0.35 |
| (1,2200) | 1:A:101:LEU:HD22 | 1:A:110:TYR:HE1 | 16 | 0.35 |
| (1,2200) | 1:A:101:LEU:HD22 | 1:A:110:TYR:HE2 | 16 | 0.35 |
| (1,2200) | 1:A:101:LEU:HD23 | 1:A:110:TYR:HE1 | 16 | 0.35 |
| (1,2200) | 1:A:101:LEU:HD23 | 1:A:110:TYR:HE2 | 16 | 0.35 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 17 | 0.35 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD22 | 17 | 0.35 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD23 | 17 | 0.35 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 17 | 0.35 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 17 | 0.35 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 17 | 0.35 |
| (1,1977) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:80:ASN:HB3 | 12 | 0.35 |
| (1,1912) | 1:A:98:GLN:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 2 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1711) | 1:A:39:ILE:H | 1:A:51:GLY:HA2 | 12 | 0.35 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 3 | 0.35 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:98:GLN:HA | 19 | 0.35 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:98:GLN:HA | 19 | 0.35 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:98:GLN:HA | 19 | 0.35 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD11 | 1 | 0.35 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD12 | 1 | 0.35 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD13 | 1 | 0.35 |
| (1,1327) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:ASN:HD21 | 17 | 0.35 |
| (1,1254) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HG2 | 16 | 0.35 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:31:ILE:H | 6 | 0.35 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:31:ILE:H | 6 | 0.35 |
| (1,1130) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:31:ILE:H | 6 | 0.35 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:101:LEU:HG | 17 | 0.34 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:101:LEU:HG | 17 | 0.34 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:101:LEU:HG | 17 | 0.34 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:108:LEU:HD21 | 19 | 0.34 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:108:LEU:HD22 | 19 | 0.34 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:108:LEU:HD23 | 19 | 0.34 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:108:LEU:HD21 | 19 | 0.34 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:108:LEU:HD22 | 19 | 0.34 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:108:LEU:HD23 | 19 | 0.34 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:108:LEU:HD21 | 19 | 0.34 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:108:LEU:HD22 | 19 | 0.34 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:108:LEU:HD23 | 19 | 0.34 |
| (1,747) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HG | 2 | 0.34 |
| (1,747) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HG | 16 | 0.34 |
| (1,661) | 1:A:98:GLN:HG3 | 1:A:109:THR:HB | 18 | 0.34 |
| (1,638) | 1:A:26:LYS:HA | 1:A:26:LYS:HD3 | 13 | 0.34 |
| (1,638) | 1:A:26:LYS:HA | 1:A:26:LYS:HD3 | 19 | 0.34 |
| (1,354) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG3 | 3 | 0.34 |
| (1,354) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG3 | 12 | 0.34 |
| (1,339) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:GLY:H | 17 | 0.34 |
| (1,311) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:111:LYS:H | 6 | 0.34 |
| (1,286) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:57:GLU:HB2 | 3 | 0.34 |
| (1,286) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:57:GLU:HB2 | 11 | 0.34 |
| (1,248) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:H | 10 | 0.34 |
| (1,240) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HB2 | 10 | 0.34 |
| (1,240) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HB2 | 12 | 0.34 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD11 | 2 | 0.34 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD12 | 2 | 0.34 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD13 | 2 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD21 | 2 | 0.34 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD22 | 2 | 0.34 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD23 | 2 | 0.34 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD11 | 4 | 0.34 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD12 | 4 | 0.34 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD13 | 4 | 0.34 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD21 | 4 | 0.34 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD22 | 4 | 0.34 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD23 | 4 | 0.34 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 2 | 0.34 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HB3 | 7 | 0.34 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HB3 | 7 | 0.34 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HB3 | 7 | 0.34 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HB3 | 7 | 0.34 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HB3 | 7 | 0.34 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HB3 | 7 | 0.34 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD21 | 2 | 0.34 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD22 | 2 | 0.34 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD23 | 2 | 0.34 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 19 | 0.34 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 19 | 0.34 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 19 | 0.34 |
| (1,1691) | 1:A:98:GLN:HB2 | 1:A:99:LEU:H | 4 | 0.34 |
| (1,1691) | 1:A:98:GLN:HB2 | 1:A:99:LEU:H | 19 | 0.34 |
| (1,158) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:46:ARG:H | 19 | 0.34 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE1 | 2 | 0.34 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE2 | 2 | 0.34 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE3 | 2 | 0.34 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 10 | 0.34 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 15 | 0.34 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 15 | 0.34 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 15 | 0.34 |
| (1,909) | 1:A:111:LYS:HG3 | 1:A:112:LEU:H | 11 | 0.33 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 12 | 0.33 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 12 | 0.33 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 12 | 0.33 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 12 | 0.33 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 12 | 0.33 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 12 | 0.33 |
| (1,868) | 1:A:63:LEU:HD11 | 1:A:83:SER:HB2 | 7 | 0.33 |
| (1,868) | 1:A:63:LEU:HD12 | 1:A:83:SER:HB2 | 7 | 0.33 |
| (1,868) | 1:A:63:LEU:HD13 | 1:A:83:SER:HB2 | 7 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,868) | 1:A:63:LEU:HD21 | 1:A:83:SER:HB2 | 7 | 0.33 |
| (1,868) | 1:A:63:LEU:HD22 | 1:A:83:SER:HB2 | 7 | 0.33 |
| (1,868) | 1:A:63:LEU:HD23 | 1:A:83:SER:HB2 | 7 | 0.33 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 3 | 0.33 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 3 | 0.33 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 3 | 0.33 |
| (1,848) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:84:GLU:HB2 | 7 | 0.33 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB3 | 9 | 0.33 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB3 | 9 | 0.33 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB3 | 9 | 0.33 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB3 | 10 | 0.33 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB3 | 10 | 0.33 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB3 | 10 | 0.33 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 16 | 0.33 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 16 | 0.33 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 16 | 0.33 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 16 | 0.33 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 16 | 0.33 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 16 | 0.33 |
| (1,638) | 1:A:26:LYS:HA | 1:A:26:LYS:HD3 | 2 | 0.33 |
| (1,638) | 1:A:26:LYS:HA | 1:A:26:LYS:HD3 | 4 | 0.33 |
| (1,605) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:8:GLN:HE2 | 15 | 0.33 |
| (1,588) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:85:MET:H | 12 | 0.33 |
| (1,515) | 1:A:73:PRO:HB3 | 1:A:74:GLN:H | 6 | 0.33 |
| (1,514) | 1:A:20:LYS:HA | 1:A:21:PRO:HB2 | 1 | 0.33 |
| (1,410) | 1:A:74:GLN:HG2 | 1:A:78:LEU:HD21 | 11 | 0.33 |
| (1,410) | 1:A:74:GLN:HG2 | 1:A:78:LEU:HD22 | 11 | 0.33 |
| (1,410) | 1:A:74:GLN:HG2 | 1:A:78:LEU:HD23 | 11 | 0.33 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HB3 | 16 | 0.33 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HB3 | 16 | 0.33 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HB3 | 16 | 0.33 |
| (1,381) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HB2 | 17 | 0.33 |
| (1,339) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:GLY:H | 14 | 0.33 |
| (1,339) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:GLY:H | 16 | 0.33 |
| (1,269) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:45:ASN:H | 11 | 0.33 |
| (1,240) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HB2 | 8 | 0.33 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 6 | 0.33 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD11 | 17 | 0.33 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD12 | 17 | 0.33 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD13 | 17 | 0.33 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD11 | 17 | 0.33 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD12 | 17 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD13 | 17 | 0.33 |
| (1,2116) | 1:A:105:LYS:H | 1:A:105:LYS:HG3 | 2 | 0.33 |
| (1,2116) | 1:A:105:LYS:H | 1:A:105:LYS:HG3 | 5 | 0.33 |
| (1,2018) | 1:A:74:GLN:HB2 | 1:A:75:LEU:H | 4 | 0.33 |
| (1,1843) | 1:A:23:THR:H | 1:A:74:GLN:HE21 | 6 | 0.33 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD21 | 16 | 0.33 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD22 | 16 | 0.33 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD23 | 16 | 0.33 |
| (1,1691) | 1:A:98:GLN:HB2 | 1:A:99:LEU:H | 17 | 0.33 |
| (1,1174) | 1:A:66:THR:HA | 1:A:67:ARG:HG3 | 4 | 0.33 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG21 | 2 | 0.33 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG22 | 2 | 0.33 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG23 | 2 | 0.33 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG21 | 2 | 0.33 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG22 | 2 | 0.33 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG23 | 2 | 0.33 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG21 | 16 | 0.33 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG22 | 16 | 0.33 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG23 | 16 | 0.33 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG21 | 16 | 0.33 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG22 | 16 | 0.33 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG23 | 16 | 0.33 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB1 | 10 | 0.33 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB2 | 10 | 0.33 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB3 | 10 | 0.33 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:95:THR:H | 12 | 0.32 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:95:THR:H | 12 | 0.32 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:95:THR:H | 12 | 0.32 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 19 | 0.32 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 19 | 0.32 |
| (1,914) | 1:A:92:VAL:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 19 | 0.32 |
| (1,880) | 1:A:98:GLN:HA | 1:A:111:LYS:HG3 | 14 | 0.32 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 0.32 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 0.32 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 0.32 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 0.32 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 0.32 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 0.32 |
| (1,630) | 1:A:82:ILE:HG12 | 1:A:86:LEU:HG | 12 | 0.32 |
| (1,588) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:85:MET:H | 5 | 0.32 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD1 | 1:A:65:MET:HG3 | 8 | 0.32 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD2 | 1:A:65:MET:HG3 | 8 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,515) | 1:A:73:PRO:HB3 | 1:A:74:GLN:H | 16 | 0.32 |
| (1,515) | 1:A:73:PRO:HB3 | 1:A:74:GLN:H | 17 | 0.32 |
| (1,514) | 1:A:20:LYS:HA | 1:A:21:PRO:HB2 | 5 | 0.32 |
| (1,514) | 1:A:20:LYS:HA | 1:A:21:PRO:HB2 | 7 | 0.32 |
| (1,514) | 1:A:20:LYS:HA | 1:A:21:PRO:HB2 | 13 | 0.32 |
| (1,407) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:74:GLN:HE22 | 19 | 0.32 |
| (1,380) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:52:LYS:HB2 | 17 | 0.32 |
| (1,321) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:91:GLN:HA | 16 | 0.32 |
| (1,285) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:55:ASN:HD22 | 1 | 0.32 |
| (1,240) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HB2 | 3 | 0.32 |
| (1,240) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HB2 | 11 | 0.32 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD11 | 9 | 0.32 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD12 | 9 | 0.32 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD13 | 9 | 0.32 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD21 | 9 | 0.32 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD22 | 9 | 0.32 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD23 | 9 | 0.32 |
| (1,1792) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 14 | 0.32 |
| (1,179) | 1:A:52:LYS:HE2 | 1:A:54:SER:HB2 | 11 | 0.32 |
| (1,179) | 1:A:52:LYS:HE3 | 1:A:54:SER:HB2 | 11 | 0.32 |
| (1,1691) | 1:A:98:GLN:HB2 | 1:A:99:LEU:H | 14 | 0.32 |
| (1,1691) | 1:A:98:GLN:HB2 | 1:A:99:LEU:H | 15 | 0.32 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 3 | 0.32 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 3 | 0.32 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 3 | 0.32 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB1 | 1:A:86:LEU:HB2 | 19 | 0.32 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HB2 | 19 | 0.32 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB3 | 1:A:86:LEU:HB2 | 19 | 0.32 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD11 | 8 | 0.31 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD12 | 8 | 0.31 |
| (1,949) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:94:LEU:HD13 | 8 | 0.31 |
| (1,948) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:98:GLN:H | 1 | 0.31 |
| (1,948) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:98:GLN:H | 1 | 0.31 |
| (1,948) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:98:GLN:H | 1 | 0.31 |
| (1,948) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:98:GLN:H | 19 | 0.31 |
| (1,948) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:98:GLN:H | 19 | 0.31 |
| (1,948) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:98:GLN:H | 19 | 0.31 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 12 | 0.31 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD12 | 12 | 0.31 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD13 | 12 | 0.31 |
| (1,8) | 1:A:61:LYS:HG2 | 1:A:62:GLY:HA3 | 7 | 0.31 |
| (1,8) | 1:A:61:LYS:HG3 | 1:A:62:GLY:HA3 | 7 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,695) | 1:A:42:SER:HA | 1:A:46:ARG:HG2 | 17 | 0.31 |
| (1,596) | 1:A:76:ASN:H | 1:A:77:GLU:HB2 | 14 | 0.31 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD1 | 1:A:65:MET:HG3 | 10 | 0.31 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD2 | 1:A:65:MET:HG3 | 10 | 0.31 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD1 | 1:A:65:MET:HG3 | 14 | 0.31 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD2 | 1:A:65:MET:HG3 | 14 | 0.31 |
| (1,514) | 1:A:20:LYS:HA | 1:A:21:PRO:HB2 | 12 | 0.31 |
| (1,468) | 1:A:26:LYS:HB2 | 1:A:27:ASN:H | 14 | 0.31 |
| (1,427) | 1:A:60:ALA:HA | 1:A:61:LYS:HB2 | 13 | 0.31 |
| (1,359) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:111:LYS:HB2 | 12 | 0.31 |
| (1,285) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:55:ASN:HD22 | 8 | 0.31 |
| (1,273) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HB2 | 8 | 0.31 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD11 | 7 | 0.31 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD12 | 7 | 0.31 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD13 | 7 | 0.31 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD21 | 2 | 0.31 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD22 | 2 | 0.31 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE1 | 1:A:112:LEU:HD23 | 2 | 0.31 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD21 | 2 | 0.31 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD22 | 2 | 0.31 |
| (1,2188) | 1:A:12:PHE:HE2 | 1:A:112:LEU:HD23 | 2 | 0.31 |
| (1,2074) | 1:A:26:LYS:HB2 | 1:A:27:ASN:HD22 | 5 | 0.31 |
| (1,1972) | 1:A:8:GLN:HG2 | 1:A:35:GLU:H | 5 | 0.31 |
| (1,1940) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HG3 | 4 | 0.31 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HB3 | 3 | 0.31 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HB3 | 3 | 0.31 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HB3 | 3 | 0.31 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HB3 | 3 | 0.31 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HB3 | 3 | 0.31 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HB3 | 3 | 0.31 |
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 12 | 0.31 |
| (1,1711) | 1:A:39:ILE:H | 1:A:51:GLY:HA2 | 18 | 0.31 |
| (1,1691) | 1:A:98:GLN:HB2 | 1:A:99:LEU:H | 18 | 0.31 |
| (1,1560) | 1:A:69:MET:HA | 1:A:70:CYS:HB3 | 3 | 0.31 |
| (1,1515) | 1:A:46:ARG:HA | 1:A:46:ARG:HG2 | 18 | 0.31 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 14 | 0.31 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG21 | 10 | 0.31 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG22 | 10 | 0.31 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG23 | 10 | 0.31 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG21 | 10 | 0.31 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG22 | 10 | 0.31 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG23 | 10 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG21 | 17 | 0.31 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG22 | 17 | 0.31 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG23 | 17 | 0.31 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG21 | 17 | 0.31 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG22 | 17 | 0.31 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG23 | 17 | 0.31 |
| (1,1086) | 1:A:24:SER:HB2 | 1:A:75:LEU:HD21 | 7 | 0.31 |
| (1,1086) | 1:A:24:SER:HB2 | 1:A:75:LEU:HD22 | 7 | 0.31 |
| (1,1086) | 1:A:24:SER:HB2 | 1:A:75:LEU:HD23 | 7 | 0.31 |
| (1,948) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:98:GLN:H | 4 | 0.3 |
| (1,948) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:98:GLN:H | 4 | 0.3 |
| (1,948) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:98:GLN:H | 4 | 0.3 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 15 | 0.3 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 15 | 0.3 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 15 | 0.3 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 15 | 0.3 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 15 | 0.3 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 15 | 0.3 |
| (1,874) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:H | 10 | 0.3 |
| (1,874) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:H | 10 | 0.3 |
| (1,874) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:H | 10 | 0.3 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB3 | 14 | 0.3 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB3 | 14 | 0.3 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB3 | 14 | 0.3 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 7 | 0.3 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD12 | 7 | 0.3 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD13 | 7 | 0.3 |
| (1,798) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:78:LEU:HD21 | 8 | 0.3 |
| (1,798) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:78:LEU:HD22 | 8 | 0.3 |
| (1,798) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:78:LEU:HD23 | 8 | 0.3 |
| (1,617) | 1:A:31:ILE:HG12 | 1:A:41:GLY:HA2 | 2 | 0.3 |
| (1,515) | 1:A:73:PRO:HB3 | 1:A:74:GLN:H | 2 | 0.3 |
| (1,514) | 1:A:20:LYS:HA | 1:A:21:PRO:HB2 | 16 | 0.3 |
| (1,514) | 1:A:20:LYS:HA | 1:A:21:PRO:HB2 | 18 | 0.3 |
| (1,285) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:55:ASN:HD22 | 3 | 0.3 |
| (1,285) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:55:ASN:HD22 | 11 | 0.3 |
| (1,285) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:55:ASN:HD22 | 12 | 0.3 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD11 | 5 | 0.3 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD12 | 5 | 0.3 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD13 | 5 | 0.3 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD11 | 6 | 0.3 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD12 | 6 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD13 | 6 | 0.3 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD21 | 6 | 0.3 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD22 | 6 | 0.3 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD23 | 6 | 0.3 |
| (1,239) | 1:A:59:THR:HA | 1:A:86:LEU:HB2 | 3 | 0.3 |
| (1,2141) | 1:A:106:GLN:HE21 | 1:A:108:LEU:HD21 | 11 | 0.3 |
| (1,2141) | 1:A:106:GLN:HE21 | 1:A:108:LEU:HD22 | 11 | 0.3 |
| (1,2141) | 1:A:106:GLN:HE21 | 1:A:108:LEU:HD23 | 11 | 0.3 |
| (1,2016) | 1:A:106:GLN:HE22 | 1:A:107:THR:H | 11 | 0.3 |
| (1,1940) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HG3 | 14 | 0.3 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 10 | 0.3 |
| (1,1874) | 1:A:110:TYR:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 11 | 0.3 |
| (1,1799) | 1:A:95:THR:H | 1:A:98:GLN:HB2 | 9 | 0.3 |
| (1,158) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:46:ARG:H | 1 | 0.3 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 2 | 0.3 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HA | 1 | 0.3 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HA | 1 | 0.3 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HA | 1 | 0.3 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HA | 10 | 0.3 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HA | 10 | 0.3 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HA | 10 | 0.3 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HA | 16 | 0.3 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HA | 16 | 0.3 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HA | 16 | 0.3 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:6:GLN:HE21 | 8 | 0.3 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:6:GLN:HE21 | 8 | 0.3 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:6:GLN:HE21 | 8 | 0.3 |
| (1,887) | 1:A:20:LYS:HG2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 11 | 0.29 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD21 | 1:A:109:THR:H | 16 | 0.29 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD22 | 1:A:109:THR:H | 16 | 0.29 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD23 | 1:A:109:THR:H | 16 | 0.29 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD11 | 5 | 0.29 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD12 | 5 | 0.29 |
| (1,806) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HD13 | 5 | 0.29 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 4 | 0.29 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 4 | 0.29 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 4 | 0.29 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 4 | 0.29 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 4 | 0.29 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 4 | 0.29 |
| (1,63) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 7 | 0.29 |
| (1,63) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 7 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,595) | 1:A:77:GLU:HB2 | 1:A:78:LEU:H | 3 | 0.29 |
| (1,590) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:105:LYS:HE2 | 14 | 0.29 |
| (1,590) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:105:LYS:HE3 | 14 | 0.29 |
| (1,537) | 1:A:65:MET:HG3 | 1:A:66:THR:H | 12 | 0.29 |
| (1,468) | 1:A:26:LYS:HB2 | 1:A:27:ASN:H | 7 | 0.29 |
| (1,407) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:74:GLN:HE22 | 10 | 0.29 |
| (1,407) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:74:GLN:HE22 | 12 | 0.29 |
| (1,345) | 1:A:84:GLU:HG2 | 1:A:85:MET:H | 15 | 0.29 |
| (1,273) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HB2 | 14 | 0.29 |
| (1,255) | 1:A:96:ALA:HB1 | 1:A:97:ASN:HB2 | 18 | 0.29 |
| (1,255) | 1:A:96:ALA:HB2 | 1:A:97:ASN:HB2 | 18 | 0.29 |
| (1,255) | 1:A:96:ALA:HB3 | 1:A:97:ASN:HB2 | 18 | 0.29 |
| (1,240) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HB2 | 4 | 0.29 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD11 | 12 | 0.29 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD12 | 12 | 0.29 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD13 | 12 | 0.29 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD11 | 12 | 0.29 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD12 | 12 | 0.29 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD13 | 12 | 0.29 |
| (1,216) | 1:A:114:ASP:HB2 | 1:A:115:LEU:HG | 15 | 0.29 |
| (1,216) | 1:A:114:ASP:HB2 | 1:A:115:LEU:HG | 17 | 0.29 |
| (1,2130) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:7:LEU:HG | 9 | 0.29 |
| (1,1969) | 1:A:27:ASN:H | 1:A:27:ASN:HB2 | 19 | 0.29 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 3 | 0.29 |
| (1,1754) | 1:A:101:LEU:H | 1:A:108:LEU:HD11 | 6 | 0.29 |
| (1,1754) | 1:A:101:LEU:H | 1:A:108:LEU:HD12 | 6 | 0.29 |
| (1,1754) | 1:A:101:LEU:H | 1:A:108:LEU:HD13 | 6 | 0.29 |
| (1,1640) | 1:A:27:ASN:HA | 1:A:28:PRO:HD3 | 3 | 0.29 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:98:GLN:HA | 13 | 0.29 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:98:GLN:HA | 13 | 0.29 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:98:GLN:HA | 13 | 0.29 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD11 | 12 | 0.29 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD12 | 12 | 0.29 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD13 | 12 | 0.29 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 0.29 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 0.29 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 0.29 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 0.29 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 0.29 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 0.29 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 19 | 0.29 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 19 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 19 | 0.29 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 8 | 0.29 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG21 | 9 | 0.29 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG22 | 9 | 0.29 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG23 | 9 | 0.29 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG21 | 9 | 0.29 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG22 | 9 | 0.29 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG23 | 9 | 0.29 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB1 | 9 | 0.29 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB2 | 9 | 0.29 |
| (1,1151) | 1:A:85:MET:HG3 | 1:A:90:ALA:HB3 | 9 | 0.29 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HA | 7 | 0.29 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HA | 7 | 0.29 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HA | 7 | 0.29 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HA | 9 | 0.29 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HA | 9 | 0.29 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HA | 9 | 0.29 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HA | 11 | 0.29 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HA | 11 | 0.29 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HA | 11 | 0.29 |
| (1,929) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:17:VAL:H | 14 | 0.28 |
| (1,909) | 1:A:111:LYS:HG3 | 1:A:112:LEU:H | 15 | 0.28 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD21 | 1:A:109:THR:H | 11 | 0.28 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD22 | 1:A:109:THR:H | 11 | 0.28 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD23 | 1:A:109:THR:H | 11 | 0.28 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 16 | 0.28 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 16 | 0.28 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 16 | 0.28 |
| (1,825) | 1:A:84:GLU:HA | 1:A:87:LYS:HG2 | 3 | 0.28 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 18 | 0.28 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 18 | 0.28 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 18 | 0.28 |
| (1,661) | 1:A:98:GLN:HG3 | 1:A:109:THR:HB | 15 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:26:LYS:HA | 1:A:26:LYS:HD3 | 15 | 0.28 |
| (1,595) | 1:A:77:GLU:HB2 | 1:A:78:LEU:H | 19 | 0.28 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD1 | 1:A:65:MET:HG3 | 16 | 0.28 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD2 | 1:A:65:MET:HG3 | 16 | 0.28 |
| (1,542) | 1:A:64:ALA:HB1 | 1:A:65:MET:HG3 | 19 | 0.28 |
| (1,542) | 1:A:64:ALA:HB2 | 1:A:65:MET:HG3 | 19 | 0.28 |
| (1,542) | 1:A:64:ALA:HB3 | 1:A:65:MET:HG3 | 19 | 0.28 |
| (1,527) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HG2 | 11 | 0.28 |
| (1,514) | 1:A:20:LYS:HA | 1:A:21:PRO:HB2 | 3 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,514) | 1:A:20:LYS:HA | 1:A:21:PRO:HB2 | 14 | 0.28 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HB3 | 3 | 0.28 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HB3 | 3 | 0.28 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HB3 | 3 | 0.28 |
| (1,380) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:52:LYS:HB2 | 15 | 0.28 |
| (1,262) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:97:ASN:HD22 | 6 | 0.28 |
| (1,262) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:97:ASN:HD22 | 17 | 0.28 |
| (1,240) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HB2 | 9 | 0.28 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD11 | 18 | 0.28 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD12 | 18 | 0.28 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD13 | 18 | 0.28 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD21 | 18 | 0.28 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD22 | 18 | 0.28 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD23 | 18 | 0.28 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD11 | 18 | 0.28 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD12 | 18 | 0.28 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD13 | 18 | 0.28 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD11 | 18 | 0.28 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD12 | 18 | 0.28 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD13 | 18 | 0.28 |
| (1,216) | 1:A:114:ASP:HB2 | 1:A:115:LEU:HG | 5 | 0.28 |
| (1,2140) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:106:GLN:HE22 | 14 | 0.28 |
| (1,209) | 1:A:113:ALA:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 5 | 0.28 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 4 | 0.28 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD21 | 5 | 0.28 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD22 | 5 | 0.28 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD23 | 5 | 0.28 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 15 | 0.28 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 15 | 0.28 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 15 | 0.28 |
| (1,1221) | 1:A:31:ILE:HA | 1:A:41:GLY:HA2 | 15 | 0.28 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:H | 1 | 0.28 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:H | 1 | 0.28 |
| (1,1161) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:H | 1 | 0.28 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HA | 17 | 0.28 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HA | 17 | 0.28 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HA | 17 | 0.28 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:95:THR:H | 7 | 0.27 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:95:THR:H | 7 | 0.27 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:95:THR:H | 7 | 0.27 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD11 | 13 | 0.27 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD12 | 13 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD13 | 13 | 0.27 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 13 | 0.27 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 13 | 0.27 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 13 | 0.27 |
| (1,698) | 1:A:42:SER:HB2 | 1:A:46:ARG:HG3 | 16 | 0.27 |
| (1,695) | 1:A:42:SER:HA | 1:A:46:ARG:HG2 | 18 | 0.27 |
| (1,629) | 1:A:82:ILE:HG12 | 1:A:83:SER:H | 18 | 0.27 |
| (1,617) | 1:A:31:ILE:HG12 | 1:A:41:GLY:HA2 | 5 | 0.27 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD1 | 1:A:65:MET:HG3 | 5 | 0.27 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD2 | 1:A:65:MET:HG3 | 5 | 0.27 |
| (1,537) | 1:A:65:MET:HG3 | 1:A:66:THR:H | 19 | 0.27 |
| (1,514) | 1:A:20:LYS:HA | 1:A:21:PRO:HB2 | 4 | 0.27 |
| (1,381) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HB2 | 3 | 0.27 |
| (1,345) | 1:A:84:GLU:HG2 | 1:A:85:MET:H | 11 | 0.27 |
| (1,321) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:91:GLN:HA | 14 | 0.27 |
| (1,277) | 1:A:44:CYS:HB2 | 1:A:45:ASN:HD22 | 14 | 0.27 |
| (1,274) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HD11 | 5 | 0.27 |
| (1,274) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HD12 | 5 | 0.27 |
| (1,274) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HD13 | 5 | 0.27 |
| (1,273) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HB2 | 6 | 0.27 |
| (1,268) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:76:ASN:HB2 | 11 | 0.27 |
| (1,262) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:97:ASN:HD22 | 4 | 0.27 |
| (1,262) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:97:ASN:HD22 | 15 | 0.27 |
| (1,262) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:97:ASN:HD22 | 16 | 0.27 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD11 | 9 | 0.27 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD12 | 9 | 0.27 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD13 | 9 | 0.27 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB2 | 1:A:75:LEU:HB3 | 16 | 0.27 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB3 | 1:A:75:LEU:HB3 | 16 | 0.27 |
| (1,240) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HB2 | 6 | 0.27 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD11 | 15 | 0.27 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD12 | 15 | 0.27 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD13 | 15 | 0.27 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD21 | 15 | 0.27 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD22 | 15 | 0.27 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD23 | 15 | 0.27 |
| (1,231) | 1:A:70:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HD11 | 5 | 0.27 |
| (1,231) | 1:A:70:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HD12 | 5 | 0.27 |
| (1,231) | 1:A:70:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HD13 | 5 | 0.27 |
| (1,2116) | 1:A:105:LYS:H | 1:A:105:LYS:HG3 | 11 | 0.27 |
| (1,1979) | 1:A:83:SER:H | 1:A:83:SER:HB3 | 1 | 0.27 |
| (1,1979) | 1:A:83:SER:H | 1:A:83:SER:HB3 | 6 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1977) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:80:ASN:HB3 | 9 | 0.27 |
| (1,176) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 18 | 0.27 |
| (1,1691) | 1:A:98:GLN:HB2 | 1:A:99:LEU:H | 11 | 0.27 |
| (1,1691) | 1:A:98:GLN:HB2 | 1:A:99:LEU:H | 13 | 0.27 |
| (1,165) | 1:A:45:ASN:HB2 | 1:A:67:ARG:HA | 5 | 0.27 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD11 | 6 | 0.27 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD12 | 6 | 0.27 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD13 | 6 | 0.27 |
| (1,158) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:46:ARG:H | 2 | 0.27 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:98:GLN:HA | 8 | 0.27 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:98:GLN:HA | 8 | 0.27 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:98:GLN:HA | 8 | 0.27 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 0.27 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 0.27 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 0.27 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 0.27 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 0.27 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 0.27 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 8 | 0.27 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 8 | 0.27 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 8 | 0.27 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD11 | 7 | 0.27 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD12 | 7 | 0.27 |
| (1,1257) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:108:LEU:HD13 | 7 | 0.27 |
| (1,1254) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HG2 | 10 | 0.27 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HA | 2 | 0.27 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HA | 2 | 0.27 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HA | 2 | 0.27 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HA | 6 | 0.27 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HA | 6 | 0.27 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HA | 6 | 0.27 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG11 | 15 | 0.27 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG12 | 15 | 0.27 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG13 | 15 | 0.27 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG11 | 15 | 0.27 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG12 | 15 | 0.27 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG13 | 15 | 0.27 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG11 | 15 | 0.27 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG12 | 15 | 0.27 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG13 | 15 | 0.27 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB3 | 11 | 0.26 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB3 | 11 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB3 | 11 | 0.26 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD21 | 7 | 0.26 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD22 | 7 | 0.26 |
| (1,776) | 1:A:6:GLN:HE22 | 1:A:94:LEU:HD23 | 7 | 0.26 |
| (1,514) | 1:A:20:LYS:HA | 1:A:21:PRO:HB2 | 6 | 0.26 |
| (1,514) | 1:A:20:LYS:HA | 1:A:21:PRO:HB2 | 11 | 0.26 |
| (1,359) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:111:LYS:HB2 | 19 | 0.26 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG21 | 18 | 0.26 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG22 | 18 | 0.26 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG23 | 18 | 0.26 |
| (1,277) | 1:A:44:CYS:HB2 | 1:A:45:ASN:HD22 | 18 | 0.26 |
| (1,262) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:97:ASN:HD22 | 13 | 0.26 |
| (1,2131) | 1:A:74:GLN:HA | 1:A:74:GLN:HE22 | 18 | 0.26 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE1 | 15 | 0.26 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE2 | 15 | 0.26 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE3 | 15 | 0.26 |
| (1,1691) | 1:A:98:GLN:HB2 | 1:A:99:LEU:H | 16 | 0.26 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 4 | 0.26 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 12 | 0.26 |
| (1,1640) | 1:A:27:ASN:HA | 1:A:28:PRO:HD3 | 19 | 0.26 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD11 | 9 | 0.26 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD12 | 9 | 0.26 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD13 | 9 | 0.26 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD11 | 9 | 0.26 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD12 | 9 | 0.26 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD13 | 9 | 0.26 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD11 | 9 | 0.26 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD12 | 9 | 0.26 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD13 | 9 | 0.26 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD11 | 4 | 0.26 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD12 | 4 | 0.26 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD13 | 4 | 0.26 |
| (1,146) | 1:A:31:ILE:HB | 1:A:41:GLY:HA2 | 15 | 0.26 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:106:GLN:HE22 | 13 | 0.26 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:106:GLN:HE22 | 13 | 0.26 |
| (1,1334) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 13 | 0.26 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB1 | 7 | 0.26 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB2 | 7 | 0.26 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB3 | 7 | 0.26 |
| (1,1149) | 1:A:101:LEU:HD11 | 1:A:102:ALA:H | 3 | 0.26 |
| (1,1149) | 1:A:101:LEU:HD12 | 1:A:102:ALA:H | 3 | 0.26 |
| (1,1149) | 1:A:101:LEU:HD13 | 1:A:102:ALA:H | 3 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:95:THR:H | 19 | 0.25 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:95:THR:H | 19 | 0.25 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:95:THR:H | 19 | 0.25 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 9 | 0.25 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 9 | 0.25 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 9 | 0.25 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 9 | 0.25 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 9 | 0.25 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 9 | 0.25 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD21 | 1:A:109:THR:H | 15 | 0.25 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD22 | 1:A:109:THR:H | 15 | 0.25 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD23 | 1:A:109:THR:H | 15 | 0.25 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD11 | 9 | 0.25 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD12 | 9 | 0.25 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD13 | 9 | 0.25 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 19 | 0.25 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 19 | 0.25 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 19 | 0.25 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD21 | 19 | 0.25 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD22 | 19 | 0.25 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD23 | 19 | 0.25 |
| (1,747) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HG | 9 | 0.25 |
| (1,747) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HG | 11 | 0.25 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD11 | 9 | 0.25 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD12 | 9 | 0.25 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD13 | 9 | 0.25 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD11 | 9 | 0.25 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD12 | 9 | 0.25 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD13 | 9 | 0.25 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD11 | 9 | 0.25 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD12 | 9 | 0.25 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD13 | 9 | 0.25 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 7 | 0.25 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 7 | 0.25 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 7 | 0.25 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 7 | 0.25 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 7 | 0.25 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 7 | 0.25 |
| (1,661) | 1:A:98:GLN:HG3 | 1:A:109:THR:HB | 3 | 0.25 |
| (1,63) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 2 | 0.25 |
| (1,63) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 2 | 0.25 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD21 | 8 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD22 | 8 | 0.25 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD23 | 8 | 0.25 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HB3 | 5 | 0.25 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HB3 | 5 | 0.25 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HB3 | 5 | 0.25 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG21 | 1 | 0.25 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG22 | 1 | 0.25 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG23 | 1 | 0.25 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD11 | 9 | 0.25 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD12 | 9 | 0.25 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD13 | 9 | 0.25 |
| (1,262) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:97:ASN:HD22 | 14 | 0.25 |
| (1,2199) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:9:HIS:HD2 | 10 | 0.25 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD11 | 1 | 0.25 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD12 | 1 | 0.25 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD13 | 1 | 0.25 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD11 | 1 | 0.25 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD12 | 1 | 0.25 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD13 | 1 | 0.25 |
| (1,2116) | 1:A:105:LYS:H | 1:A:105:LYS:HG3 | 9 | 0.25 |
| (1,209) | 1:A:113:ALA:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 9 | 0.25 |
| (1,2016) | 1:A:106:GLN:HE22 | 1:A:107:THR:H | 19 | 0.25 |
| (1,1977) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:80:ASN:HB3 | 5 | 0.25 |
| (1,1977) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:80:ASN:HB3 | 11 | 0.25 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 6 | 0.25 |
| (1,1691) | 1:A:98:GLN:HB2 | 1:A:99:LEU:H | 10 | 0.25 |
| (1,1640) | 1:A:27:ASN:HA | 1:A:28:PRO:HD3 | 2 | 0.25 |
| (1,158) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:46:ARG:H | 11 | 0.25 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD11 | 12 | 0.25 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD12 | 12 | 0.25 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD13 | 12 | 0.25 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD11 | 12 | 0.25 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD12 | 12 | 0.25 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD13 | 12 | 0.25 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD11 | 12 | 0.25 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD12 | 12 | 0.25 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD13 | 12 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:51:GLY:HA2 | 3 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:51:GLY:HA2 | 3 | 0.25 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:51:GLY:HA2 | 3 | 0.25 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB1 | 1:A:86:LEU:HB2 | 8 | 0.25 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HB2 | 8 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB3 | 1:A:86:LEU:HB2 | 8 | 0.25 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB1 | 1:A:86:LEU:HB2 | 12 | 0.25 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HB2 | 12 | 0.25 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB3 | 1:A:86:LEU:HB2 | 12 | 0.25 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:82:ILE:H | 8 | 0.24 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:82:ILE:H | 8 | 0.24 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:82:ILE:H | 8 | 0.24 |
| (1,950) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:97:ASN:HA | 1 | 0.24 |
| (1,950) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:97:ASN:HA | 1 | 0.24 |
| (1,950) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:97:ASN:HA | 1 | 0.24 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:101:LEU:HG | 5 | 0.24 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:101:LEU:HG | 5 | 0.24 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:101:LEU:HG | 5 | 0.24 |
| (1,874) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:H | 12 | 0.24 |
| (1,874) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:H | 12 | 0.24 |
| (1,874) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:H | 12 | 0.24 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 6 | 0.24 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 6 | 0.24 |
| (1,853) | 1:A:108:LEU:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 6 | 0.24 |
| (1,81) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:110:TYR:HB2 | 11 | 0.24 |
| (1,514) | 1:A:20:LYS:HA | 1:A:21:PRO:HB2 | 17 | 0.24 |
| (1,380) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:52:LYS:HB2 | 13 | 0.24 |
| (1,359) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:111:LYS:HB2 | 14 | 0.24 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD11 | 7 | 0.24 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD12 | 7 | 0.24 |
| (1,290) | 1:A:82:ILE:HB | 1:A:108:LEU:HD13 | 7 | 0.24 |
| (1,277) | 1:A:44:CYS:HB2 | 1:A:45:ASN:HD22 | 13 | 0.24 |
| (1,240) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HB2 | 14 | 0.24 |
| (1,228) | 1:A:70:CYS:H | 1:A:70:CYS:HB3 | 2 | 0.24 |
| (1,2199) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:9:HIS:HD2 | 11 | 0.24 |
| (1,2199) | 1:A:8:GLN:HB3 | 1:A:9:HIS:HD2 | 16 | 0.24 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD11 | 4 | 0.24 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD12 | 4 | 0.24 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD13 | 4 | 0.24 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD11 | 4 | 0.24 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD12 | 4 | 0.24 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD13 | 4 | 0.24 |
| (1,1979) | 1:A:83:SER:H | 1:A:83:SER:HB3 | 12 | 0.24 |
| (1,1979) | 1:A:83:SER:H | 1:A:83:SER:HB3 | 13 | 0.24 |
| (1,1977) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:80:ASN:HB3 | 3 | 0.24 |
| (1,182) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:45:ASN:HB3 | 14 | 0.24 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD21 | 8 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD22 | 8 | 0.24 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD23 | 8 | 0.24 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD21 | 6 | 0.24 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD22 | 6 | 0.24 |
| (1,1727) | 1:A:18:ASN:H | 1:A:108:LEU:HD23 | 6 | 0.24 |
| (1,1640) | 1:A:27:ASN:HA | 1:A:28:PRO:HD3 | 15 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:51:GLY:HA2 | 10 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:51:GLY:HA2 | 10 | 0.24 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:51:GLY:HA2 | 10 | 0.24 |
| (1,1254) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HG2 | 9 | 0.24 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG21 | 1 | 0.24 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG22 | 1 | 0.24 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG23 | 1 | 0.24 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG21 | 1 | 0.24 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG22 | 1 | 0.24 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG23 | 1 | 0.24 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG11 | 4 | 0.24 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG12 | 4 | 0.24 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG13 | 4 | 0.24 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG11 | 4 | 0.24 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG12 | 4 | 0.24 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG13 | 4 | 0.24 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG11 | 4 | 0.24 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG12 | 4 | 0.24 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG13 | 4 | 0.24 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:82:ILE:H | 11 | 0.23 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:82:ILE:H | 11 | 0.23 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:82:ILE:H | 11 | 0.23 |
| (1,926) | 1:A:11:ARG:HB2 | 1:A:32:SER:HB2 | 4 | 0.23 |
| (1,926) | 1:A:11:ARG:HB3 | 1:A:32:SER:HB2 | 4 | 0.23 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 4 | 0.23 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 4 | 0.23 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 4 | 0.23 |
| (1,848) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:84:GLU:HB2 | 3 | 0.23 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD11 | 16 | 0.23 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD12 | 16 | 0.23 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD13 | 16 | 0.23 |
| (1,81) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:110:TYR:HB2 | 8 | 0.23 |
| (1,81) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:110:TYR:HB2 | 14 | 0.23 |
| (1,63) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 16 | 0.23 |
| (1,63) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 16 | 0.23 |
| (1,515) | 1:A:73:PRO:HB3 | 1:A:74:GLN:H | 15 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,514) | 1:A:20:LYS:HA | 1:A:21:PRO:HB2 | 9 | 0.23 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD21 | 5 | 0.23 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD22 | 5 | 0.23 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD23 | 5 | 0.23 |
| (1,468) | 1:A:26:LYS:HB2 | 1:A:27:ASN:H | 1 | 0.23 |
| (1,381) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,380) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:52:LYS:HB2 | 14 | 0.23 |
| (1,300) | 1:A:18:ASN:HB3 | 1:A:106:GLN:HE22 | 15 | 0.23 |
| (1,273) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:75:LEU:HB2 | 1 | 0.23 |
| (1,262) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:97:ASN:HD22 | 10 | 0.23 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB2 | 1:A:75:LEU:HB3 | 3 | 0.23 |
| (1,245) | 1:A:72:ASN:HB3 | 1:A:75:LEU:HB3 | 3 | 0.23 |
| (1,216) | 1:A:114:ASP:HB2 | 1:A:115:LEU:HG | 12 | 0.23 |
| (1,1979) | 1:A:83:SER:H | 1:A:83:SER:HB3 | 7 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:80:ASN:HB3 | 14 | 0.23 |
| (1,1977) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:80:ASN:HB3 | 16 | 0.23 |
| (1,1969) | 1:A:27:ASN:H | 1:A:27:ASN:HB2 | 4 | 0.23 |
| (1,1939) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:68:MET:HG3 | 4 | 0.23 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HB3 | 16 | 0.23 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HB3 | 16 | 0.23 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HB3 | 16 | 0.23 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HB3 | 16 | 0.23 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HB3 | 16 | 0.23 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HB3 | 16 | 0.23 |
| (1,1792) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 18 | 0.23 |
| (1,1754) | 1:A:101:LEU:H | 1:A:108:LEU:HD11 | 3 | 0.23 |
| (1,1754) | 1:A:101:LEU:H | 1:A:108:LEU:HD12 | 3 | 0.23 |
| (1,1754) | 1:A:101:LEU:H | 1:A:108:LEU:HD13 | 3 | 0.23 |
| (1,1691) | 1:A:98:GLN:HB2 | 1:A:99:LEU:H | 8 | 0.23 |
| (1,1663) | 1:A:14:LEU:H | 1:A:29:PRO:HD3 | 14 | 0.23 |
| (1,165) | 1:A:45:ASN:HB2 | 1:A:67:ARG:HA | 18 | 0.23 |
| (1,1598) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD21 | 10 | 0.23 |
| (1,1598) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD22 | 10 | 0.23 |
| (1,1598) | 1:A:94:LEU:HA | 1:A:99:LEU:HD23 | 10 | 0.23 |
| (1,158) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:46:ARG:H | 6 | 0.23 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:51:GLY:HA2 | 14 | 0.23 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 14 | 0.23 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 14 | 0.23 |
| (1,1278) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:HA | 8 | 0.23 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 15 | 0.23 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG21 | 6 | 0.23 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG22 | 6 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG23 | 6 | 0.23 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG21 | 6 | 0.23 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG22 | 6 | 0.23 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG23 | 6 | 0.23 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HA | 5 | 0.23 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HA | 5 | 0.23 |
| (1,1134) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HA | 5 | 0.23 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB1 | 1:A:86:LEU:HB2 | 15 | 0.23 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HB2 | 15 | 0.23 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB3 | 1:A:86:LEU:HB2 | 15 | 0.23 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:6:GLN:HE21 | 11 | 0.23 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:6:GLN:HE21 | 11 | 0.23 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:6:GLN:HE21 | 11 | 0.23 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 19 | 0.23 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 19 | 0.23 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 19 | 0.23 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 17 | 0.22 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 17 | 0.22 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 17 | 0.22 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 17 | 0.22 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 17 | 0.22 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 17 | 0.22 |
| (1,877) | 1:A:12:PHE:HD1 | 1:A:99:LEU:HD11 | 6 | 0.22 |
| (1,877) | 1:A:12:PHE:HD1 | 1:A:99:LEU:HD12 | 6 | 0.22 |
| (1,877) | 1:A:12:PHE:HD1 | 1:A:99:LEU:HD13 | 6 | 0.22 |
| (1,877) | 1:A:12:PHE:HD2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 6 | 0.22 |
| (1,877) | 1:A:12:PHE:HD2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 6 | 0.22 |
| (1,877) | 1:A:12:PHE:HD2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 6 | 0.22 |
| (1,81) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:110:TYR:HB2 | 2 | 0.22 |
| (1,81) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:110:TYR:HB2 | 7 | 0.22 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 9 | 0.22 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 9 | 0.22 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 9 | 0.22 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD21 | 9 | 0.22 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD22 | 9 | 0.22 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD23 | 9 | 0.22 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 13 | 0.22 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 13 | 0.22 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 13 | 0.22 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 13 | 0.22 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 13 | 0.22 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 13 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,625) | 1:A:31:ILE:HG13 | 1:A:33:PHE:HZ | 3 | 0.22 |
| (1,582) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HB3 | 3 | 0.22 |
| (1,49) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:99:LEU:HD21 | 10 | 0.22 |
| (1,49) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:99:LEU:HD22 | 10 | 0.22 |
| (1,49) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:99:LEU:HD23 | 10 | 0.22 |
| (1,410) | 1:A:74:GLN:HG2 | 1:A:78:LEU:HD21 | 17 | 0.22 |
| (1,410) | 1:A:74:GLN:HG2 | 1:A:78:LEU:HD22 | 17 | 0.22 |
| (1,410) | 1:A:74:GLN:HG2 | 1:A:78:LEU:HD23 | 17 | 0.22 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HB3 | 14 | 0.22 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HB3 | 14 | 0.22 |
| (1,397) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HB3 | 14 | 0.22 |
| (1,381) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HB2 | 7 | 0.22 |
| (1,330) | 1:A:87:LYS:H | 1:A:88:GLU:HG3 | 18 | 0.22 |
| (1,262) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:97:ASN:HD22 | 18 | 0.22 |
| (1,230) | 1:A:70:CYS:HB3 | 1:A:76:ASN:H | 1 | 0.22 |
| (1,2140) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:106:GLN:HE22 | 2 | 0.22 |
| (1,2140) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:106:GLN:HE22 | 16 | 0.22 |
| (1,1691) | 1:A:98:GLN:HB2 | 1:A:99:LEU:H | 7 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD11 | 12 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD12 | 12 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD13 | 12 | 0.22 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD11 | 11 | 0.22 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD12 | 11 | 0.22 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD13 | 11 | 0.22 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD21 | 18 | 0.22 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD22 | 18 | 0.22 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD23 | 18 | 0.22 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 18 | 0.22 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 18 | 0.22 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 18 | 0.22 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 18 | 0.22 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 18 | 0.22 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 18 | 0.22 |
| (1,13) | 1:A:58:LEU:HB2 | 1:A:90:ALA:H | 11 | 0.22 |
| (1,1254) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HG2 | 14 | 0.22 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 18 | 0.22 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG11 | 8 | 0.22 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG12 | 8 | 0.22 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG13 | 8 | 0.22 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG11 | 8 | 0.22 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG12 | 8 | 0.22 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG13 | 8 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG11 | 8 | 0.22 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG12 | 8 | 0.22 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG13 | 8 | 0.22 |
| (1,81) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:110:TYR:HB2 | 10 | 0.21 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 12 | 0.21 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 12 | 0.21 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 12 | 0.21 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 12 | 0.21 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 12 | 0.21 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 12 | 0.21 |
| (1,63) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 5 | 0.21 |
| (1,63) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 5 | 0.21 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD1 | 1:A:65:MET:HG3 | 4 | 0.21 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD2 | 1:A:65:MET:HG3 | 4 | 0.21 |
| (1,527) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HG2 | 14 | 0.21 |
| (1,381) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HB2 | 4 | 0.21 |
| (1,359) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:111:LYS:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG21 | 19 | 0.21 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG22 | 19 | 0.21 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG23 | 19 | 0.21 |
| (1,285) | 1:A:55:ASN:HB2 | 1:A:55:ASN:HD22 | 19 | 0.21 |
| (1,255) | 1:A:96:ALA:HB1 | 1:A:97:ASN:HB2 | 19 | 0.21 |
| (1,255) | 1:A:96:ALA:HB2 | 1:A:97:ASN:HB2 | 19 | 0.21 |
| (1,255) | 1:A:96:ALA:HB3 | 1:A:97:ASN:HB2 | 19 | 0.21 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD11 | 11 | 0.21 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD12 | 11 | 0.21 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD13 | 11 | 0.21 |
| (1,228) | 1:A:70:CYS:H | 1:A:70:CYS:HB3 | 18 | 0.21 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD11 | 15 | 0.21 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD12 | 15 | 0.21 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD13 | 15 | 0.21 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD11 | 15 | 0.21 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD12 | 15 | 0.21 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD13 | 15 | 0.21 |
| (1,2116) | 1:A:105:LYS:H | 1:A:105:LYS:HG3 | 12 | 0.21 |
| (1,1977) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:80:ASN:HB3 | 17 | 0.21 |
| (1,1976) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ASN:H | 16 | 0.21 |
| (1,1917) | 1:A:24:SER:HB2 | 1:A:26:LYS:H | 11 | 0.21 |
| (1,1841) | 1:A:69:MET:H | 1:A:69:MET:HG3 | 16 | 0.21 |
| (1,1802) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:H | 18 | 0.21 |
| (1,1792) | 1:A:11:ARG:H | 1:A:114:ASP:HB3 | 15 | 0.21 |
| (1,1691) | 1:A:98:GLN:HB2 | 1:A:99:LEU:H | 3 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1691) | 1:A:98:GLN:HB2 | 1:A:99:LEU:H | 6 | 0.21 |
| (1,1640) | 1:A:27:ASN:HA | 1:A:28:PRO:HD3 | 12 | 0.21 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD11 | 7 | 0.21 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD12 | 7 | 0.21 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD11 | 1:A:99:LEU:HD13 | 7 | 0.21 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD11 | 7 | 0.21 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD12 | 7 | 0.21 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD12 | 1:A:99:LEU:HD13 | 7 | 0.21 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD11 | 7 | 0.21 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD12 | 7 | 0.21 |
| (1,1538) | 1:A:31:ILE:HD13 | 1:A:99:LEU:HD13 | 7 | 0.21 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD11 | 18 | 0.21 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD12 | 18 | 0.21 |
| (1,1527) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:HD13 | 18 | 0.21 |
| (1,1401) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HB3 | 4 | 0.21 |
| (1,1401) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HB3 | 4 | 0.21 |
| (1,1401) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HB3 | 4 | 0.21 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:51:GLY:HA2 | 16 | 0.21 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:51:GLY:HA2 | 16 | 0.21 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:51:GLY:HA2 | 16 | 0.21 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 3 | 0.21 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 16 | 0.21 |
| (1,1118) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HD11 | 12 | 0.21 |
| (1,1118) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HD12 | 12 | 0.21 |
| (1,1118) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HD13 | 12 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 4 | 0.2 |
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 9 | 0.2 |
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 11 | 0.2 |
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 19 | 0.2 |
| (1,978) | 1:A:12:PHE:HZ | 1:A:112:LEU:HD21 | 5 | 0.2 |
| (1,978) | 1:A:12:PHE:HZ | 1:A:112:LEU:HD22 | 5 | 0.2 |
| (1,978) | 1:A:12:PHE:HZ | 1:A:112:LEU:HD23 | 5 | 0.2 |
| (1,909) | 1:A:111:LYS:HG3 | 1:A:112:LEU:H | 5 | 0.2 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD11 | 15 | 0.2 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD12 | 15 | 0.2 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD13 | 15 | 0.2 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD11 | 15 | 0.2 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD12 | 15 | 0.2 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD13 | 15 | 0.2 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD11 | 15 | 0.2 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD12 | 15 | 0.2 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD13 | 15 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 6 | 0.2 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 6 | 0.2 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 6 | 0.2 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 6 | 0.2 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 6 | 0.2 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 6 | 0.2 |
| (1,691) | 1:A:42:SER:HB2 | 1:A:46:ARG:HG2 | 17 | 0.2 |
| (1,638) | 1:A:26:LYS:HA | 1:A:26:LYS:HD3 | 16 | 0.2 |
| (1,629) | 1:A:82:ILE:HG12 | 1:A:83:SER:H | 13 | 0.2 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD1 | 1:A:65:MET:HG3 | 2 | 0.2 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD2 | 1:A:65:MET:HG3 | 2 | 0.2 |
| (1,381) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HB2 | 5 | 0.2 |
| (1,354) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG3 | 17 | 0.2 |
| (1,277) | 1:A:44:CYS:HB2 | 1:A:45:ASN:HD22 | 15 | 0.2 |
| (1,1969) | 1:A:27:ASN:H | 1:A:27:ASN:HB2 | 9 | 0.2 |
| (1,1874) | 1:A:110:TYR:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 2 | 0.2 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE1 | 3 | 0.2 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE2 | 3 | 0.2 |
| (1,1804) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:HE3 | 3 | 0.2 |
| (1,1803) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:67:ARG:HA | 9 | 0.2 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD11 | 7 | 0.2 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD12 | 7 | 0.2 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD13 | 7 | 0.2 |
| (1,158) | 1:A:45:ASN:HB3 | 1:A:46:ARG:H | 16 | 0.2 |
| (1,1425) | 1:A:44:CYS:HB2 | 1:A:75:LEU:HA | 11 | 0.2 |
| (1,1278) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:HA | 9 | 0.2 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG21 | 11 | 0.2 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG22 | 11 | 0.2 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:13:VAL:HG23 | 11 | 0.2 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG21 | 11 | 0.2 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG22 | 11 | 0.2 |
| (1,1168) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:13:VAL:HG23 | 11 | 0.2 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB1 | 1:A:86:LEU:HB2 | 9 | 0.2 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB2 | 1:A:86:LEU:HB2 | 9 | 0.2 |
| (1,1080) | 1:A:60:ALA:HB3 | 1:A:86:LEU:HB2 | 9 | 0.2 |
| (1,1040) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:94:LEU:H | 17 | 0.2 |
| (1,1040) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:94:LEU:H | 17 | 0.2 |
| (1,1040) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:94:LEU:H | 17 | 0.2 |
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 1 | 0.19 |
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 2 | 0.19 |
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 3 | 0.19 |
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 5 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 6 | 0.19 |
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 7 | 0.19 |
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 8 | 0.19 |
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 10 | 0.19 |
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 12 | 0.19 |
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 13 | 0.19 |
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 14 | 0.19 |
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 15 | 0.19 |
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 16 | 0.19 |
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 17 | 0.19 |
| (2,1) | 1:A:44:CYS:SG | 1:A:70:CYS:SG | 18 | 0.19 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:95:THR:H | 4 | 0.19 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:95:THR:H | 4 | 0.19 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:95:THR:H | 4 | 0.19 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB2 | 5 | 0.19 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB2 | 5 | 0.19 |
| (1,903) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB2 | 5 | 0.19 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD11 | 7 | 0.19 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD12 | 7 | 0.19 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD13 | 7 | 0.19 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 7 | 0.19 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 7 | 0.19 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 7 | 0.19 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 5 | 0.19 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 5 | 0.19 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 5 | 0.19 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 5 | 0.19 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 5 | 0.19 |
| (1,878) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 5 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:108:LEU:HD21 | 3 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:108:LEU:HD22 | 3 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:108:LEU:HD23 | 3 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:108:LEU:HD21 | 3 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:108:LEU:HD22 | 3 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:108:LEU:HD23 | 3 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:108:LEU:HD21 | 3 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:108:LEU:HD22 | 3 | 0.19 |
| (1,857) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:108:LEU:HD23 | 3 | 0.19 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD11 | 8 | 0.19 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD12 | 8 | 0.19 |
| (1,814) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD13 | 8 | 0.19 |
| (1,81) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:110:TYR:HB2 | 13 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,747) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HG | 3 | 0.19 |
| (1,660) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HB | 4 | 0.19 |
| (1,629) | 1:A:82:ILE:HG12 | 1:A:83:SER:H | 8 | 0.19 |
| (1,582) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HB3 | 6 | 0.19 |
| (1,572) | 1:A:6:GLN:HB3 | 1:A:7:LEU:H | 8 | 0.19 |
| (1,537) | 1:A:65:MET:HG3 | 1:A:66:THR:H | 7 | 0.19 |
| (1,527) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HG2 | 2 | 0.19 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD21 | 16 | 0.19 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD22 | 16 | 0.19 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD23 | 16 | 0.19 |
| (1,381) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HB2 | 15 | 0.19 |
| (1,380) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:52:LYS:HB2 | 1 | 0.19 |
| (1,380) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:52:LYS:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,263) | 1:A:80:ASN:HB3 | 1:A:81:THR:H | 15 | 0.19 |
| (1,255) | 1:A:96:ALA:HB1 | 1:A:97:ASN:HB2 | 14 | 0.19 |
| (1,255) | 1:A:96:ALA:HB2 | 1:A:97:ASN:HB2 | 14 | 0.19 |
| (1,255) | 1:A:96:ALA:HB3 | 1:A:97:ASN:HB2 | 14 | 0.19 |
| (1,228) | 1:A:70:CYS:H | 1:A:70:CYS:HB3 | 1 | 0.19 |
| (1,2140) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:106:GLN:HE22 | 13 | 0.19 |
| (1,2102) | 1:A:8:GLN:HE22 | 1:A:37:MET:H | 15 | 0.19 |
| (1,2024) | 1:A:70:CYS:HB2 | 1:A:72:ASN:H | 2 | 0.19 |
| (1,2018) | 1:A:74:GLN:HB2 | 1:A:75:LEU:H | 8 | 0.19 |
| (1,1977) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:80:ASN:HB3 | 8 | 0.19 |
| (1,1939) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:68:MET:HG3 | 17 | 0.19 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 11 | 0.19 |
| (1,1850) | 1:A:32:SER:H | 1:A:41:GLY:HA2 | 12 | 0.19 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 9 | 0.19 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 9 | 0.19 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 9 | 0.19 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 17 | 0.19 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 17 | 0.19 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 17 | 0.19 |
| (1,1711) | 1:A:39:ILE:H | 1:A:51:GLY:HA2 | 14 | 0.19 |
| (1,1691) | 1:A:98:GLN:HB2 | 1:A:99:LEU:H | 1 | 0.19 |
| (1,1640) | 1:A:27:ASN:HA | 1:A:28:PRO:HD3 | 5 | 0.19 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD11 | 2 | 0.19 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD12 | 2 | 0.19 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD13 | 2 | 0.19 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD11 | 2 | 0.19 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD12 | 2 | 0.19 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD13 | 2 | 0.19 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD11 | 2 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD12 | 2 | 0.19 |
| (1,1349) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD13 | 2 | 0.19 |
| (1,1278) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:HA | 19 | 0.19 |
| (1,1255) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HB3 | 6 | 0.19 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:110:TYR:HB2 | 19 | 0.19 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:110:TYR:HB2 | 19 | 0.19 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:110:TYR:HB2 | 19 | 0.19 |
| (1,1132) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:14:LEU:H | 1 | 0.19 |
| (1,1132) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:14:LEU:H | 1 | 0.19 |
| (1,1132) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:14:LEU:H | 1 | 0.19 |
| (1,1132) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:14:LEU:H | 5 | 0.19 |
| (1,1132) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:14:LEU:H | 5 | 0.19 |
| (1,1132) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:14:LEU:H | 5 | 0.19 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:6:GLN:HE21 | 4 | 0.19 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:6:GLN:HE21 | 4 | 0.19 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:6:GLN:HE21 | 4 | 0.19 |
| (1,1060) | 1:A:46:ARG:HB3 | 1:A:66:THR:HG21 | 9 | 0.19 |
| (1,1060) | 1:A:46:ARG:HB3 | 1:A:66:THR:HG22 | 9 | 0.19 |
| (1,1060) | 1:A:46:ARG:HB3 | 1:A:66:THR:HG23 | 9 | 0.19 |
| (1,81) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:110:TYR:HB2 | 4 | 0.18 |
| (1,81) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:110:TYR:HB2 | 16 | 0.18 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 13 | 0.18 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 13 | 0.18 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 13 | 0.18 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD21 | 13 | 0.18 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD22 | 13 | 0.18 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD23 | 13 | 0.18 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE1 | 11 | 0.18 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HE2 | 11 | 0.18 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE1 | 11 | 0.18 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HE2 | 11 | 0.18 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE1 | 11 | 0.18 |
| (1,722) | 1:A:108:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HE2 | 11 | 0.18 |
| (1,666) | 1:A:3:THR:HB | 1:A:4:PRO:HG3 | 1 | 0.18 |
| (1,629) | 1:A:82:ILE:HG12 | 1:A:83:SER:H | 7 | 0.18 |
| (1,617) | 1:A:31:ILE:HG12 | 1:A:41:GLY:HA2 | 7 | 0.18 |
| (1,572) | 1:A:6:GLN:HB3 | 1:A:7:LEU:H | 18 | 0.18 |
| (1,527) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HG2 | 9 | 0.18 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 3 | 0.18 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 3 | 0.18 |
| (1,449) | 1:A:37:MET:HG2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 3 | 0.18 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG21 | 10 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG22 | 10 | 0.18 |
| (1,329) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:109:THR:HG23 | 10 | 0.18 |
| (1,270) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:45:ASN:HD22 | 12 | 0.18 |
| (1,262) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:97:ASN:HD22 | 12 | 0.18 |
| (1,257) | 1:A:76:ASN:HB2 | 1:A:77:GLU:HB2 | 15 | 0.18 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD11 | 4 | 0.18 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD12 | 4 | 0.18 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD13 | 4 | 0.18 |
| (1,240) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HB2 | 18 | 0.18 |
| (1,228) | 1:A:70:CYS:H | 1:A:70:CYS:HB3 | 12 | 0.18 |
| (1,2140) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:106:GLN:HE22 | 5 | 0.18 |
| (1,1812) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 5 | 0.18 |
| (1,1812) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 7 | 0.18 |
| (1,1812) | 1:A:20:LYS:H | 1:A:20:LYS:HG2 | 15 | 0.18 |
| (1,1640) | 1:A:27:ASN:HA | 1:A:28:PRO:HD3 | 1 | 0.18 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD11 | 11 | 0.18 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD12 | 11 | 0.18 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD13 | 11 | 0.18 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HD3 | 12 | 0.18 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HD3 | 12 | 0.18 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HD3 | 12 | 0.18 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:28:PRO:HD3 | 15 | 0.18 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:28:PRO:HD3 | 15 | 0.18 |
| (1,1128) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:28:PRO:HD3 | 15 | 0.18 |
| (1,950) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:97:ASN:HA | 6 | 0.17 |
| (1,950) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:97:ASN:HA | 6 | 0.17 |
| (1,950) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:97:ASN:HA | 6 | 0.17 |
| (1,874) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:H | 15 | 0.17 |
| (1,874) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:H | 15 | 0.17 |
| (1,874) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:H | 15 | 0.17 |
| (1,825) | 1:A:84:GLU:HA | 1:A:87:LYS:HG2 | 5 | 0.17 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 7 | 0.17 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 7 | 0.17 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 7 | 0.17 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD21 | 7 | 0.17 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD22 | 7 | 0.17 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD23 | 7 | 0.17 |
| (1,747) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HG | 19 | 0.17 |
| (1,661) | 1:A:98:GLN:HG3 | 1:A:109:THR:HB | 5 | 0.17 |
| (1,661) | 1:A:98:GLN:HG3 | 1:A:109:THR:HB | 19 | 0.17 |
| (1,629) | 1:A:82:ILE:HG12 | 1:A:83:SER:H | 6 | 0.17 |
| (1,582) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HB3 | 11 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,571) | 1:A:3:THR:H | 1:A:6:GLN:HB3 | 8 | 0.17 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD1 | 1:A:65:MET:HG3 | 12 | 0.17 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD2 | 1:A:65:MET:HG3 | 12 | 0.17 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD21 | 9 | 0.17 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD22 | 9 | 0.17 |
| (1,489) | 1:A:106:GLN:HB2 | 1:A:108:LEU:HD23 | 9 | 0.17 |
| (1,398) | 1:A:85:MET:HB3 | 1:A:86:LEU:H | 10 | 0.17 |
| (1,321) | 1:A:57:GLU:HG2 | 1:A:91:GLN:HA | 4 | 0.17 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD11 | 13 | 0.17 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD12 | 13 | 0.17 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD13 | 13 | 0.17 |
| (1,228) | 1:A:70:CYS:H | 1:A:70:CYS:HB3 | 6 | 0.17 |
| (1,222) | 1:A:39:ILE:HB | 1:A:51:GLY:HA2 | 18 | 0.17 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD11 | 14 | 0.17 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD12 | 14 | 0.17 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:58:LEU:HD13 | 14 | 0.17 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD11 | 14 | 0.17 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD12 | 14 | 0.17 |
| (1,2179) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:58:LEU:HD13 | 14 | 0.17 |
| (1,2116) | 1:A:105:LYS:H | 1:A:105:LYS:HG3 | 19 | 0.17 |
| (1,2098) | 1:A:72:ASN:HD21 | 1:A:74:GLN:HB2 | 8 | 0.17 |
| (1,2074) | 1:A:26:LYS:HB2 | 1:A:27:ASN:HD22 | 2 | 0.17 |
| (1,1988) | 1:A:105:LYS:HG2 | 1:A:106:GLN:H | 17 | 0.17 |
| (1,1977) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:80:ASN:HB3 | 1 | 0.17 |
| (1,1920) | 1:A:45:ASN:H | 1:A:45:ASN:HD22 | 11 | 0.17 |
| (1,1911) | 1:A:98:GLN:H | 1:A:98:GLN:HG3 | 7 | 0.17 |
| (1,1869) | 1:A:84:GLU:H | 1:A:85:MET:HG2 | 3 | 0.17 |
| (1,1802) | 1:A:45:ASN:HD21 | 1:A:69:MET:H | 11 | 0.17 |
| (1,1640) | 1:A:27:ASN:HA | 1:A:28:PRO:HD3 | 4 | 0.17 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:51:GLY:HA2 | 15 | 0.17 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 15 | 0.17 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 15 | 0.17 |
| (1,1188) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:84:GLU:HB2 | 16 | 0.17 |
| (1,1119) | 1:A:86:LEU:HD11 | 1:A:89:GLY:H | 12 | 0.17 |
| (1,1119) | 1:A:86:LEU:HD12 | 1:A:89:GLY:H | 12 | 0.17 |
| (1,1119) | 1:A:86:LEU:HD13 | 1:A:89:GLY:H | 12 | 0.17 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HG2 | 4 | 0.17 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HG2 | 4 | 0.17 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HG2 | 4 | 0.17 |
| (1,1060) | 1:A:46:ARG:HB3 | 1:A:66:THR:HG21 | 2 | 0.17 |
| (1,1060) | 1:A:46:ARG:HB3 | 1:A:66:THR:HG22 | 2 | 0.17 |
| (1,1060) | 1:A:46:ARG:HB3 | 1:A:66:THR:HG23 | 2 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:HG21 | 6 | 0.17 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:HG22 | 6 | 0.17 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:HG23 | 6 | 0.17 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:HG21 | 6 | 0.17 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:HG22 | 6 | 0.17 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:HG23 | 6 | 0.17 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:HG21 | 6 | 0.17 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:HG22 | 6 | 0.17 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:HG23 | 6 | 0.17 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:92:VAL:HG21 | 6 | 0.17 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:92:VAL:HG22 | 6 | 0.17 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:92:VAL:HG23 | 6 | 0.17 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:92:VAL:HG21 | 6 | 0.17 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:92:VAL:HG22 | 6 | 0.17 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:92:VAL:HG23 | 6 | 0.17 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:92:VAL:HG21 | 6 | 0.17 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:92:VAL:HG22 | 6 | 0.17 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:92:VAL:HG23 | 6 | 0.17 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 1 | 0.16 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 1 | 0.16 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 1 | 0.16 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 11 | 0.16 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 11 | 0.16 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 11 | 0.16 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 11 | 0.16 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 11 | 0.16 |
| (1,962) | 1:A:51:GLY:HA2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 11 | 0.16 |
| (1,909) | 1:A:111:LYS:HG3 | 1:A:112:LEU:H | 14 | 0.16 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:110:TYR:HB3 | 5 | 0.16 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:110:TYR:HB3 | 5 | 0.16 |
| (1,84) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:110:TYR:HB3 | 5 | 0.16 |
| (1,798) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:78:LEU:HD21 | 14 | 0.16 |
| (1,798) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:78:LEU:HD22 | 14 | 0.16 |
| (1,798) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:78:LEU:HD23 | 14 | 0.16 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 1 | 0.16 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 1 | 0.16 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 1 | 0.16 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD21 | 1 | 0.16 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD22 | 1 | 0.16 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD23 | 1 | 0.16 |
| (1,747) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HG | 7 | 0.16 |
| (1,629) | 1:A:82:ILE:HG12 | 1:A:83:SER:H | 10 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,617) | 1:A:31:ILE:HG12 | 1:A:41:GLY:HA2 | 13 | 0.16 |
| (1,609) | 1:A:111:LYS:HG3 | 1:A:111:LYS:HD2 | 4 | 0.16 |
| (1,538) | 1:A:47:PHE:HA | 1:A:65:MET:HG3 | 12 | 0.16 |
| (1,538) | 1:A:47:PHE:HA | 1:A:65:MET:HG3 | 17 | 0.16 |
| (1,527) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HG2 | 13 | 0.16 |
| (1,527) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HG2 | 19 | 0.16 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:106:GLN:HB3 | 12 | 0.16 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:106:GLN:HB3 | 12 | 0.16 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:106:GLN:HB3 | 12 | 0.16 |
| (1,407) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:74:GLN:HE22 | 5 | 0.16 |
| (1,381) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HB2 | 14 | 0.16 |
| (1,380) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:52:LYS:HB2 | 7 | 0.16 |
| (1,362) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:111:LYS:HE2 | 9 | 0.16 |
| (1,362) | 1:A:111:LYS:HB2 | 1:A:111:LYS:HE3 | 9 | 0.16 |
| (1,267) | 1:A:76:ASN:HB3 | 1:A:77:GLU:HB2 | 19 | 0.16 |
| (1,262) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:97:ASN:HD22 | 11 | 0.16 |
| (1,255) | 1:A:96:ALA:HB1 | 1:A:97:ASN:HB2 | 4 | 0.16 |
| (1,255) | 1:A:96:ALA:HB2 | 1:A:97:ASN:HB2 | 4 | 0.16 |
| (1,255) | 1:A:96:ALA:HB3 | 1:A:97:ASN:HB2 | 4 | 0.16 |
| (1,252) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HB2 | 15 | 0.16 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD11 | 1 | 0.16 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD12 | 1 | 0.16 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD13 | 1 | 0.16 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD11 | 2 | 0.16 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD12 | 2 | 0.16 |
| (1,251) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:112:LEU:HD13 | 2 | 0.16 |
| (1,240) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HB2 | 19 | 0.16 |
| (1,230) | 1:A:70:CYS:HB3 | 1:A:76:ASN:H | 12 | 0.16 |
| (1,222) | 1:A:39:ILE:HB | 1:A:51:GLY:HA2 | 12 | 0.16 |
| (1,2139) | 1:A:61:LYS:HB2 | 1:A:62:GLY:H | 19 | 0.16 |
| (1,2044) | 1:A:7:LEU:H | 1:A:8:GLN:HB2 | 11 | 0.16 |
| (1,1988) | 1:A:105:LYS:HG2 | 1:A:106:GLN:H | 7 | 0.16 |
| (1,1977) | 1:A:80:ASN:H | 1:A:80:ASN:HB3 | 2 | 0.16 |
| (1,1953) | 1:A:24:SER:H | 1:A:24:SER:HB2 | 7 | 0.16 |
| (1,1843) | 1:A:23:THR:H | 1:A:74:GLN:HE21 | 9 | 0.16 |
| (1,180) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:H | 13 | 0.16 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 6 | 0.16 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 6 | 0.16 |
| (1,178) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 6 | 0.16 |
| (1,1659) | 1:A:20:LYS:HB2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 11 | 0.16 |
| (1,1656) | 1:A:20:LYS:HB2 | 1:A:21:PRO:HD2 | 10 | 0.16 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD11 | 15 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD12 | 15 | 0.16 |
| (1,1618) | 1:A:97:ASN:HA | 1:A:112:LEU:HD13 | 15 | 0.16 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD11 | 7 | 0.16 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD12 | 7 | 0.16 |
| (1,1499) | 1:A:114:ASP:HA | 1:A:115:LEU:HD13 | 7 | 0.16 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE1 | 1:A:117:ASN:HB3 | 18 | 0.16 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE2 | 1:A:117:ASN:HB3 | 18 | 0.16 |
| (1,1374) | 1:A:116:MET:HE3 | 1:A:117:ASN:HB3 | 18 | 0.16 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD21 | 19 | 0.16 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD22 | 19 | 0.16 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD23 | 19 | 0.16 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD21 | 19 | 0.16 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD22 | 19 | 0.16 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD23 | 19 | 0.16 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD21 | 19 | 0.16 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD22 | 19 | 0.16 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD23 | 19 | 0.16 |
| (1,1254) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HG2 | 7 | 0.16 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 5 | 0.16 |
| (1,1187) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:21:PRO:HA | 16 | 0.16 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB1 | 14 | 0.16 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB2 | 14 | 0.16 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB3 | 14 | 0.16 |
| (1,1081) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD21 | 7 | 0.16 |
| (1,1081) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD22 | 7 | 0.16 |
| (1,1081) | 1:A:72:ASN:HD22 | 1:A:75:LEU:HD23 | 7 | 0.16 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HG2 | 9 | 0.16 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HG2 | 9 | 0.16 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HG2 | 9 | 0.16 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:HG21 | 3 | 0.16 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:HG22 | 3 | 0.16 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:HG23 | 3 | 0.16 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:HG21 | 3 | 0.16 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:HG22 | 3 | 0.16 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:HG23 | 3 | 0.16 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:HG21 | 3 | 0.16 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:HG22 | 3 | 0.16 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:HG23 | 3 | 0.16 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:92:VAL:HG21 | 3 | 0.16 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:92:VAL:HG22 | 3 | 0.16 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:92:VAL:HG23 | 3 | 0.16 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:92:VAL:HG21 | 3 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:92:VAL:HG22 | 3 | 0.16 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:92:VAL:HG23 | 3 | 0.16 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:92:VAL:HG21 | 3 | 0.16 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:92:VAL:HG22 | 3 | 0.16 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:92:VAL:HG23 | 3 | 0.16 |
| (1,950) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:97:ASN:HA | 18 | 0.15 |
| (1,950) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:97:ASN:HA | 18 | 0.15 |
| (1,950) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:97:ASN:HA | 18 | 0.15 |
| (1,887) | 1:A:20:LYS:HG2 | 1:A:21:PRO:HD3 | 9 | 0.15 |
| (1,81) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:110:TYR:HB2 | 9 | 0.15 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD11 | 16 | 0.15 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD12 | 16 | 0.15 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE1 | 1:A:108:LEU:HD13 | 16 | 0.15 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD11 | 16 | 0.15 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD12 | 16 | 0.15 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE2 | 1:A:108:LEU:HD13 | 16 | 0.15 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD11 | 16 | 0.15 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD12 | 16 | 0.15 |
| (1,724) | 1:A:43:MET:HE3 | 1:A:108:LEU:HD13 | 16 | 0.15 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 0.15 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 0.15 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 0.15 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 0.15 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 0.15 |
| (1,703) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 0.15 |
| (1,698) | 1:A:42:SER:HB2 | 1:A:46:ARG:HG3 | 2 | 0.15 |
| (1,629) | 1:A:82:ILE:HG12 | 1:A:83:SER:H | 2 | 0.15 |
| (1,582) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HB3 | 18 | 0.15 |
| (1,527) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HG2 | 15 | 0.15 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:106:GLN:HB3 | 13 | 0.15 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:106:GLN:HB3 | 13 | 0.15 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:106:GLN:HB3 | 13 | 0.15 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:106:GLN:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:106:GLN:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:106:GLN:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,49) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:99:LEU:HD21 | 15 | 0.15 |
| (1,49) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:99:LEU:HD22 | 15 | 0.15 |
| (1,49) | 1:A:94:LEU:HB2 | 1:A:99:LEU:HD23 | 15 | 0.15 |
| (1,398) | 1:A:85:MET:HB3 | 1:A:86:LEU:H | 2 | 0.15 |
| (1,398) | 1:A:85:MET:HB3 | 1:A:86:LEU:H | 8 | 0.15 |
| (1,356) | 1:A:5:GLU:HA | 1:A:8:GLN:HG3 | 19 | 0.15 |
| (1,222) | 1:A:39:ILE:HB | 1:A:51:GLY:HA2 | 5 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,2139) | 1:A:61:LYS:HB2 | 1:A:62:GLY:H | 6 | 0.15 |
| (1,2139) | 1:A:61:LYS:HB2 | 1:A:62:GLY:H | 8 | 0.15 |
| (1,1988) | 1:A:105:LYS:HG2 | 1:A:106:GLN:H | 1 | 0.15 |
| (1,1979) | 1:A:83:SER:H | 1:A:83:SER:HB3 | 5 | 0.15 |
| (1,182) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:45:ASN:HB3 | 18 | 0.15 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,1640) | 1:A:27:ASN:HA | 1:A:28:PRO:HD3 | 6 | 0.15 |
| (1,1640) | 1:A:27:ASN:HA | 1:A:28:PRO:HD3 | 13 | 0.15 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:51:GLY:HA2 | 1 | 0.15 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:51:GLY:HA2 | 1 | 0.15 |
| (1,1398) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:51:GLY:HA2 | 1 | 0.15 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,1188) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:84:GLU:HB2 | 10 | 0.15 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HG2 | 19 | 0.15 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HG2 | 19 | 0.15 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HG2 | 19 | 0.15 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD11 | 12 | 0.14 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD12 | 12 | 0.14 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE1 | 1:A:99:LEU:HD13 | 12 | 0.14 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD11 | 12 | 0.14 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD12 | 12 | 0.14 |
| (1,902) | 1:A:33:PHE:HE2 | 1:A:99:LEU:HD13 | 12 | 0.14 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD11 | 1:A:87:LYS:HA | 15 | 0.14 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD12 | 1:A:87:LYS:HA | 15 | 0.14 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD13 | 1:A:87:LYS:HA | 15 | 0.14 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD21 | 1:A:87:LYS:HA | 15 | 0.14 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD22 | 1:A:87:LYS:HA | 15 | 0.14 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD23 | 1:A:87:LYS:HA | 15 | 0.14 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD21 | 8 | 0.14 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD22 | 8 | 0.14 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG2 | 1:A:94:LEU:HD23 | 8 | 0.14 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD21 | 8 | 0.14 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD22 | 8 | 0.14 |
| (1,779) | 1:A:6:GLN:HG3 | 1:A:94:LEU:HD23 | 8 | 0.14 |
| (1,666) | 1:A:3:THR:HB | 1:A:4:PRO:HG3 | 12 | 0.14 |
| (1,661) | 1:A:98:GLN:HG3 | 1:A:109:THR:HB | 16 | 0.14 |
| (1,582) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HB3 | 9 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD1 | 1:A:65:MET:HG3 | 1 | 0.14 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD2 | 1:A:65:MET:HG3 | 1 | 0.14 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD1 | 1:A:65:MET:HG3 | 3 | 0.14 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD2 | 1:A:65:MET:HG3 | 3 | 0.14 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:106:GLN:HB3 | 6 | 0.14 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:106:GLN:HB3 | 6 | 0.14 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:106:GLN:HB3 | 6 | 0.14 |
| (1,381) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HB2 | 10 | 0.14 |
| (1,359) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:111:LYS:HB2 | 16 | 0.14 |
| (1,354) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG3 | 2 | 0.14 |
| (1,216) | 1:A:114:ASP:HB2 | 1:A:115:LEU:HG | 7 | 0.14 |
| (1,2094) | 1:A:97:ASN:HB3 | 1:A:97:ASN:HD22 | 8 | 0.14 |
| (1,2060) | 1:A:8:GLN:H | 1:A:8:GLN:HG3 | 19 | 0.14 |
| (1,1976) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ASN:H | 15 | 0.14 |
| (1,1911) | 1:A:98:GLN:H | 1:A:98:GLN:HG3 | 1 | 0.14 |
| (1,1879) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:53:LEU:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,182) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:45:ASN:HB3 | 1 | 0.14 |
| (1,180) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:H | 1 | 0.14 |
| (1,1749) | 1:A:15:GLU:H | 1:A:110:TYR:HB2 | 14 | 0.14 |
| (1,1656) | 1:A:20:LYS:HB2 | 1:A:21:PRO:HD2 | 6 | 0.14 |
| (1,1640) | 1:A:27:ASN:HA | 1:A:28:PRO:HD3 | 18 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD11 | 10 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD12 | 10 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD13 | 10 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD21 | 10 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD22 | 10 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD23 | 10 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD11 | 10 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD12 | 10 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD13 | 10 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD21 | 10 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD22 | 10 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD23 | 10 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD11 | 10 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD12 | 10 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD13 | 10 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD21 | 10 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD22 | 10 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD23 | 10 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD11 | 12 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD12 | 12 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD13 | 12 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD21 | 12 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD22 | 12 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD23 | 12 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD11 | 12 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD12 | 12 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD13 | 12 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD21 | 12 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD22 | 12 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD23 | 12 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD11 | 12 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD12 | 12 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD13 | 12 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD21 | 12 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD22 | 12 | 0.14 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD23 | 12 | 0.14 |
| (1,1401) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HB3 | 7 | 0.14 |
| (1,1401) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HB3 | 7 | 0.14 |
| (1,1401) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HB3 | 7 | 0.14 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE1 | 18 | 0.14 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE2 | 18 | 0.14 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE3 | 18 | 0.14 |
| (1,1278) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:HA | 6 | 0.14 |
| (1,1254) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HG2 | 3 | 0.14 |
| (1,1254) | 1:A:82:ILE:HA | 1:A:85:MET:HG2 | 19 | 0.14 |
| (1,122) | 1:A:63:LEU:H | 1:A:63:LEU:HB2 | 12 | 0.14 |
| (1,1132) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:14:LEU:H | 17 | 0.14 |
| (1,1132) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:14:LEU:H | 17 | 0.14 |
| (1,1132) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:14:LEU:H | 17 | 0.14 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 11 | 0.14 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 11 | 0.14 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 11 | 0.14 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 11 | 0.14 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 11 | 0.14 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 11 | 0.14 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 11 | 0.14 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 11 | 0.14 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 11 | 0.14 |
| (1,1101) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:108:LEU:HA | 6 | 0.14 |
| (1,1101) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:108:LEU:HA | 6 | 0.14 |
| (1,1101) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:108:LEU:HA | 6 | 0.14 |
| (1,1089) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HG21 | 19 | 0.14 |
| (1,1089) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HG22 | 19 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1089) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HG23 | 19 | 0.14 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HG2 | 13 | 0.14 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HG2 | 13 | 0.14 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HG2 | 13 | 0.14 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:6:GLN:HE21 | 9 | 0.14 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:6:GLN:HE21 | 9 | 0.14 |
| (1,1065) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:6:GLN:HE21 | 9 | 0.14 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:HG21 | 12 | 0.14 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:HG22 | 12 | 0.14 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:HG23 | 12 | 0.14 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:HG21 | 12 | 0.14 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:HG22 | 12 | 0.14 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:HG23 | 12 | 0.14 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:HG21 | 12 | 0.14 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:HG22 | 12 | 0.14 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:HG23 | 12 | 0.14 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:92:VAL:HG21 | 12 | 0.14 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:92:VAL:HG22 | 12 | 0.14 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:92:VAL:HG23 | 12 | 0.14 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:92:VAL:HG21 | 12 | 0.14 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:92:VAL:HG22 | 12 | 0.14 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:92:VAL:HG23 | 12 | 0.14 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:92:VAL:HG21 | 12 | 0.14 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:92:VAL:HG22 | 12 | 0.14 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:92:VAL:HG23 | 12 | 0.14 |
| (1,948) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:98:GLN:H | 9 | 0.13 |
| (1,948) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:98:GLN:H | 9 | 0.13 |
| (1,948) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:98:GLN:H | 9 | 0.13 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD11 | 1:A:101:LEU:HG | 6 | 0.13 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD12 | 1:A:101:LEU:HG | 6 | 0.13 |
| (1,905) | 1:A:99:LEU:HD13 | 1:A:101:LEU:HG | 6 | 0.13 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD21 | 14 | 0.13 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD22 | 14 | 0.13 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD23 | 14 | 0.13 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD21 | 14 | 0.13 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD22 | 14 | 0.13 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD23 | 14 | 0.13 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD21 | 14 | 0.13 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD22 | 14 | 0.13 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD23 | 14 | 0.13 |
| (1,880) | 1:A:98:GLN:HA | 1:A:111:LYS:HG3 | 8 | 0.13 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD11 | 1:A:87:LYS:HA | 8 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD12 | 1:A:87:LYS:HA | 8 | 0.13 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD13 | 1:A:87:LYS:HA | 8 | 0.13 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD21 | 1:A:87:LYS:HA | 8 | 0.13 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD22 | 1:A:87:LYS:HA | 8 | 0.13 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD23 | 1:A:87:LYS:HA | 8 | 0.13 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD21 | 15 | 0.13 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD22 | 15 | 0.13 |
| (1,854) | 1:A:17:VAL:HA | 1:A:108:LEU:HD23 | 15 | 0.13 |
| (1,848) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:84:GLU:HB2 | 8 | 0.13 |
| (1,582) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HB3 | 2 | 0.13 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD1 | 1:A:65:MET:HG3 | 18 | 0.13 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD2 | 1:A:65:MET:HG3 | 18 | 0.13 |
| (1,527) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HG2 | 4 | 0.13 |
| (1,527) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HG2 | 5 | 0.13 |
| (1,506) | 1:A:68:MET:H | 1:A:68:MET:HG2 | 11 | 0.13 |
| (1,502) | 1:A:21:PRO:HB3 | 1:A:22:VAL:H | 18 | 0.13 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:106:GLN:HB3 | 8 | 0.13 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:106:GLN:HB3 | 8 | 0.13 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:106:GLN:HB3 | 8 | 0.13 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:106:GLN:HB3 | 15 | 0.13 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:106:GLN:HB3 | 15 | 0.13 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:106:GLN:HB3 | 15 | 0.13 |
| (1,407) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:74:GLN:HE22 | 7 | 0.13 |
| (1,407) | 1:A:74:GLN:HG3 | 1:A:74:GLN:HE22 | 16 | 0.13 |
| (1,391) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:30:GLU:HB2 | 7 | 0.13 |
| (1,391) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:30:GLU:HB2 | 7 | 0.13 |
| (1,391) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:30:GLU:HB2 | 7 | 0.13 |
| (1,381) | 1:A:52:LYS:H | 1:A:52:LYS:HB2 | 2 | 0.13 |
| (1,330) | 1:A:87:LYS:H | 1:A:88:GLU:HG3 | 1 | 0.13 |
| (1,270) | 1:A:44:CYS:HB3 | 1:A:45:ASN:HD22 | 6 | 0.13 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD11 | 12 | 0.13 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD12 | 12 | 0.13 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD13 | 12 | 0.13 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD21 | 12 | 0.13 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD22 | 12 | 0.13 |
| (1,24) | 1:A:49:GLY:HA2 | 1:A:63:LEU:HD23 | 12 | 0.13 |
| (1,228) | 1:A:70:CYS:H | 1:A:70:CYS:HB3 | 17 | 0.13 |
| (1,2170) | 1:A:33:PHE:HD1 | 1:A:37:MET:HE1 | 11 | 0.13 |
| (1,2170) | 1:A:33:PHE:HD1 | 1:A:37:MET:HE2 | 11 | 0.13 |
| (1,2170) | 1:A:33:PHE:HD1 | 1:A:37:MET:HE3 | 11 | 0.13 |
| (1,2170) | 1:A:33:PHE:HD2 | 1:A:37:MET:HE1 | 11 | 0.13 |
| (1,2170) | 1:A:33:PHE:HD2 | 1:A:37:MET:HE2 | 11 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2170) | 1:A:33:PHE:HD2 | 1:A:37:MET:HE3 | 11 | 0.13 |
| (1,2139) | 1:A:61:LYS:HB2 | 1:A:62:GLY:H | 10 | 0.13 |
| (1,2116) | 1:A:105:LYS:H | 1:A:105:LYS:HG3 | 6 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG21 | 2 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG22 | 2 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG23 | 2 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG21 | 3 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG22 | 3 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG23 | 3 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG21 | 5 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG22 | 5 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG23 | 5 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG21 | 6 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG22 | 6 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG23 | 6 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG21 | 7 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG22 | 7 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG23 | 7 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG21 | 11 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG22 | 11 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG23 | 11 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG21 | 13 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG22 | 13 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG23 | 13 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG21 | 14 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG22 | 14 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG23 | 14 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG21 | 16 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG22 | 16 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG23 | 16 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG21 | 17 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG22 | 17 | 0.13 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG23 | 17 | 0.13 |
| (1,2016) | 1:A:106:GLN:HE22 | 1:A:107:THR:H | 9 | 0.13 |
| (1,1988) | 1:A:105:LYS:HG2 | 1:A:106:GLN:H | 2 | 0.13 |
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB2 | 1:A:26:LYS:HG2 | 6 | 0.13 |
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB2 | 1:A:26:LYS:HG3 | 6 | 0.13 |
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB3 | 1:A:26:LYS:HG2 | 6 | 0.13 |
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB3 | 1:A:26:LYS:HG3 | 6 | 0.13 |
| (1,1874) | 1:A:110:TYR:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 12 | 0.13 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HB3 | 10 | 0.13 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HB3 | 10 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HB3 | 10 | 0.13 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HB3 | 10 | 0.13 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HB3 | 10 | 0.13 |
| (1,18) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HB3 | 10 | 0.13 |
| (1,177) | 1:A:12:PHE:HB2 | 1:A:13:VAL:H | 1 | 0.13 |
| (1,1623) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HA | 14 | 0.13 |
| (1,1623) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HA | 14 | 0.13 |
| (1,1623) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HA | 14 | 0.13 |
| (1,1623) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HA | 14 | 0.13 |
| (1,1623) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HA | 14 | 0.13 |
| (1,1623) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HA | 14 | 0.13 |
| (1,162) | 1:A:45:ASN:HB2 | 1:A:45:ASN:HD22 | 4 | 0.13 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:98:GLN:HA | 12 | 0.13 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:98:GLN:HA | 12 | 0.13 |
| (1,1535) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:98:GLN:HA | 12 | 0.13 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD11 | 5 | 0.13 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD12 | 5 | 0.13 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD13 | 5 | 0.13 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD11 | 5 | 0.13 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD12 | 5 | 0.13 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD13 | 5 | 0.13 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD11 | 5 | 0.13 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD12 | 5 | 0.13 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD13 | 5 | 0.13 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (1,1325) | 1:A:66:THR:HG21 | 1:A:68:MET:HE1 | 9 | 0.13 |
| (1,1325) | 1:A:66:THR:HG21 | 1:A:68:MET:HE2 | 9 | 0.13 |
| (1,1325) | 1:A:66:THR:HG21 | 1:A:68:MET:HE3 | 9 | 0.13 |
| (1,1325) | 1:A:66:THR:HG22 | 1:A:68:MET:HE1 | 9 | 0.13 |
| (1,1325) | 1:A:66:THR:HG22 | 1:A:68:MET:HE2 | 9 | 0.13 |
| (1,1325) | 1:A:66:THR:HG22 | 1:A:68:MET:HE3 | 9 | 0.13 |
| (1,1325) | 1:A:66:THR:HG23 | 1:A:68:MET:HE1 | 9 | 0.13 |
| (1,1325) | 1:A:66:THR:HG23 | 1:A:68:MET:HE2 | 9 | 0.13 |
| (1,1325) | 1:A:66:THR:HG23 | 1:A:68:MET:HE3 | 9 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|------------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:51:GLY:HA2 | 11 | 0.13 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:51:GLY:HA2 | 11 | 0.13 |
| (1,1317) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:51:GLY:HA2 | 11 | 0.13 |
| (1,1188) | 1:A:83:SER:HB2 | 1:A:84:GLU:HB2 | 3 | 0.13 |
| (1,1163) | 1:A:11:ARG:HE | 1:A:13:VAL:HG21 | 1 | 0.13 |
| (1,1163) | 1:A:11:ARG:HE | 1:A:13:VAL:HG22 | 1 | 0.13 |
| (1,1163) | 1:A:11:ARG:HE | 1:A:13:VAL:HG23 | 1 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB1 | 18 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB2 | 18 | 0.13 |
| (1,1152) | 1:A:85:MET:HB2 | 1:A:90:ALA:HB3 | 18 | 0.13 |
| (1,1137) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:15:GLU:HA | 3 | 0.13 |
| (1,1137) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:15:GLU:HA | 3 | 0.13 |
| (1,1137) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:15:GLU:HA | 3 | 0.13 |
| (1,1059) | 1:A:46:ARG:HD2 | 1:A:66:THR:HG21 | 3 | 0.13 |
| (1,1059) | 1:A:46:ARG:HD2 | 1:A:66:THR:HG22 | 3 | 0.13 |
| (1,1059) | 1:A:46:ARG:HD2 | 1:A:66:THR:HG23 | 3 | 0.13 |
| (1,1059) | 1:A:46:ARG:HD3 | 1:A:66:THR:HG21 | 3 | 0.13 |
| (1,1059) | 1:A:46:ARG:HD3 | 1:A:66:THR:HG22 | 3 | 0.13 |
| (1,1059) | 1:A:46:ARG:HD3 | 1:A:66:THR:HG23 | 3 | 0.13 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG21 | 2 | 0.13 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG22 | 2 | 0.13 |
| (1,1000) | 1:A:57:GLU:H | 1:A:92:VAL:HG23 | 2 | 0.13 |
| (1,978) | 1:A:12:PHE:HZ | 1:A:112:LEU:HD21 | 10 | 0.12 |
| (1,978) | 1:A:12:PHE:HZ | 1:A:112:LEU:HD22 | 10 | 0.12 |
| (1,978) | 1:A:12:PHE:HZ | 1:A:112:LEU:HD23 | 10 | 0.12 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD21 | 1:A:114:ASP:H | 10 | 0.12 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD22 | 1:A:114:ASP:H | 10 | 0.12 |
| (1,977) | 1:A:112:LEU:HD23 | 1:A:114:ASP:H | 10 | 0.12 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD11 | 1:A:95:THR:H | 6 | 0.12 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD12 | 1:A:95:THR:H | 6 | 0.12 |
| (1,947) | 1:A:94:LEU:HD13 | 1:A:95:THR:H | 6 | 0.12 |
| (1,942) | 1:A:40:SER:HA | 1:A:48:SER:HB2 | 12 | 0.12 |
| (1,909) | 1:A:111:LYS:HG3 | 1:A:112:LEU:H | 12 | 0.12 |
| (1,900) | 1:A:7:LEU:HD21 | 1:A:99:LEU:HD21 | 1 | 0.12 |
| (1,900) | 1:A:7:LEU:HD21 | 1:A:99:LEU:HD22 | 1 | 0.12 |
| (1,900) | 1:A:7:LEU:HD21 | 1:A:99:LEU:HD23 | 1 | 0.12 |
| (1,900) | 1:A:7:LEU:HD22 | 1:A:99:LEU:HD21 | 1 | 0.12 |
| (1,900) | 1:A:7:LEU:HD22 | 1:A:99:LEU:HD22 | 1 | 0.12 |
| (1,900) | 1:A:7:LEU:HD22 | 1:A:99:LEU:HD23 | 1 | 0.12 |
| (1,900) | 1:A:7:LEU:HD23 | 1:A:99:LEU:HD21 | 1 | 0.12 |
| (1,900) | 1:A:7:LEU:HD23 | 1:A:99:LEU:HD22 | 1 | 0.12 |
| (1,900) | 1:A:7:LEU:HD23 | 1:A:99:LEU:HD23 | 1 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD21 | 12 | 0.12 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD22 | 12 | 0.12 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG11 | 1:A:99:LEU:HD23 | 12 | 0.12 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD21 | 12 | 0.12 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD22 | 12 | 0.12 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG12 | 1:A:99:LEU:HD23 | 12 | 0.12 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD21 | 12 | 0.12 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD22 | 12 | 0.12 |
| (1,899) | 1:A:92:VAL:HG13 | 1:A:99:LEU:HD23 | 12 | 0.12 |
| (1,870) | 1:A:63:LEU:HD11 | 1:A:64:ALA:H | 18 | 0.12 |
| (1,870) | 1:A:63:LEU:HD12 | 1:A:64:ALA:H | 18 | 0.12 |
| (1,870) | 1:A:63:LEU:HD13 | 1:A:64:ALA:H | 18 | 0.12 |
| (1,870) | 1:A:63:LEU:HD21 | 1:A:64:ALA:H | 18 | 0.12 |
| (1,870) | 1:A:63:LEU:HD22 | 1:A:64:ALA:H | 18 | 0.12 |
| (1,870) | 1:A:63:LEU:HD23 | 1:A:64:ALA:H | 18 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD11 | 1:A:87:LYS:HA | 5 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD12 | 1:A:87:LYS:HA | 5 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD13 | 1:A:87:LYS:HA | 5 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD21 | 1:A:87:LYS:HA | 5 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD22 | 1:A:87:LYS:HA | 5 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD23 | 1:A:87:LYS:HA | 5 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD11 | 1:A:87:LYS:HA | 6 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD12 | 1:A:87:LYS:HA | 6 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD13 | 1:A:87:LYS:HA | 6 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD21 | 1:A:87:LYS:HA | 6 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD22 | 1:A:87:LYS:HA | 6 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD23 | 1:A:87:LYS:HA | 6 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD11 | 1:A:87:LYS:HA | 7 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD12 | 1:A:87:LYS:HA | 7 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD13 | 1:A:87:LYS:HA | 7 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD21 | 1:A:87:LYS:HA | 7 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD22 | 1:A:87:LYS:HA | 7 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD23 | 1:A:87:LYS:HA | 7 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD11 | 1:A:87:LYS:HA | 14 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD12 | 1:A:87:LYS:HA | 14 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD13 | 1:A:87:LYS:HA | 14 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD21 | 1:A:87:LYS:HA | 14 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD22 | 1:A:87:LYS:HA | 14 | 0.12 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD23 | 1:A:87:LYS:HA | 14 | 0.12 |
| (1,848) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:84:GLU:HB2 | 17 | 0.12 |
| (1,819) | 1:A:72:ASN:HB2 | 1:A:75:LEU:HD11 | 18 | 0.12 |
| (1,819) | 1:A:72:ASN:HB2 | 1:A:75:LEU:HD12 | 18 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,819) | 1:A:72:ASN:HB2 | 1:A:75:LEU:HD13 | 18 | 0.12 |
| (1,819) | 1:A:72:ASN:HB3 | 1:A:75:LEU:HD11 | 18 | 0.12 |
| (1,819) | 1:A:72:ASN:HB3 | 1:A:75:LEU:HD12 | 18 | 0.12 |
| (1,819) | 1:A:72:ASN:HB3 | 1:A:75:LEU:HD13 | 18 | 0.12 |
| (1,661) | 1:A:98:GLN:HG3 | 1:A:109:THR:HB | 1 | 0.12 |
| (1,629) | 1:A:82:ILE:HG12 | 1:A:83:SER:H | 4 | 0.12 |
| (1,607) | 1:A:8:GLN:HB2 | 1:A:8:GLN:HE22 | 5 | 0.12 |
| (1,597) | 1:A:77:GLU:HB2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 10 | 0.12 |
| (1,565) | 1:A:1:MET:HG3 | 1:A:3:THR:HG21 | 9 | 0.12 |
| (1,565) | 1:A:1:MET:HG3 | 1:A:3:THR:HG22 | 9 | 0.12 |
| (1,565) | 1:A:1:MET:HG3 | 1:A:3:THR:HG23 | 9 | 0.12 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD1 | 1:A:65:MET:HG3 | 15 | 0.12 |
| (1,544) | 1:A:47:PHE:HD2 | 1:A:65:MET:HG3 | 15 | 0.12 |
| (1,527) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HG2 | 18 | 0.12 |
| (1,468) | 1:A:26:LYS:HB2 | 1:A:27:ASN:H | 15 | 0.12 |
| (1,436) | 1:A:68:MET:H | 1:A:68:MET:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,425) | 1:A:14:LEU:HD11 | 1:A:17:VAL:HB | 17 | 0.12 |
| (1,425) | 1:A:14:LEU:HD12 | 1:A:17:VAL:HB | 17 | 0.12 |
| (1,425) | 1:A:14:LEU:HD13 | 1:A:17:VAL:HB | 17 | 0.12 |
| (1,380) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:52:LYS:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,363) | 1:A:15:GLU:HG2 | 1:A:111:LYS:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,341) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:35:GLU:HG2 | 7 | 0.12 |
| (1,341) | 1:A:35:GLU:H | 1:A:35:GLU:HG3 | 7 | 0.12 |
| (1,252) | 1:A:97:ASN:HB2 | 1:A:112:LEU:HB2 | 6 | 0.12 |
| (1,216) | 1:A:114:ASP:HB2 | 1:A:115:LEU:HG | 3 | 0.12 |
| (1,2140) | 1:A:81:THR:HA | 1:A:106:GLN:HE22 | 3 | 0.12 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG21 | 8 | 0.12 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG22 | 8 | 0.12 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG23 | 8 | 0.12 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG21 | 10 | 0.12 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG22 | 10 | 0.12 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG23 | 10 | 0.12 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG21 | 18 | 0.12 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG22 | 18 | 0.12 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG23 | 18 | 0.12 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG21 | 19 | 0.12 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG22 | 19 | 0.12 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG23 | 19 | 0.12 |
| (1,2060) | 1:A:8:GLN:H | 1:A:8:GLN:HG3 | 5 | 0.12 |
| (1,2024) | 1:A:70:CYS:HB2 | 1:A:72:ASN:H | 3 | 0.12 |
| (1,1976) | 1:A:79:ASP:HB2 | 1:A:80:ASN:H | 17 | 0.12 |
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB2 | 1:A:26:LYS:HG2 | 5 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB2 | 1:A:26:LYS:HG3 | 5 | 0.12 |
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB3 | 1:A:26:LYS:HG2 | 5 | 0.12 |
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB3 | 1:A:26:LYS:HG3 | 5 | 0.12 |
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB2 | 1:A:26:LYS:HG2 | 7 | 0.12 |
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB2 | 1:A:26:LYS:HG3 | 7 | 0.12 |
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB3 | 1:A:26:LYS:HG2 | 7 | 0.12 |
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB3 | 1:A:26:LYS:HG3 | 7 | 0.12 |
| (1,1800) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:95:THR:H | 11 | 0.12 |
| (1,1800) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:95:THR:H | 11 | 0.12 |
| (1,1800) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:95:THR:H | 11 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD21 | 15 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD22 | 15 | 0.12 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD23 | 15 | 0.12 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE2 | 12 | 0.12 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE3 | 12 | 0.12 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE2 | 12 | 0.12 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE3 | 12 | 0.12 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE2 | 12 | 0.12 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE3 | 12 | 0.12 |
| (1,165) | 1:A:45:ASN:HB2 | 1:A:67:ARG:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1640) | 1:A:27:ASN:HA | 1:A:28:PRO:HD3 | 8 | 0.12 |
| (1,1623) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:58:LEU:HA | 11 | 0.12 |
| (1,1623) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:58:LEU:HA | 11 | 0.12 |
| (1,1623) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:58:LEU:HA | 11 | 0.12 |
| (1,1623) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:58:LEU:HA | 11 | 0.12 |
| (1,1623) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:58:LEU:HA | 11 | 0.12 |
| (1,1623) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:58:LEU:HA | 11 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD11 | 4 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD12 | 4 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD13 | 4 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD11 | 4 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD12 | 4 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD13 | 4 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD11 | 4 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD12 | 4 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD13 | 4 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD11 | 19 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD12 | 19 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD13 | 19 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD21 | 19 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD22 | 19 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD23 | 19 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD11 | 19 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD12 | 19 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD13 | 19 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD21 | 19 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD22 | 19 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD23 | 19 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD11 | 19 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD12 | 19 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD13 | 19 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD21 | 19 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD22 | 19 | 0.12 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD23 | 19 | 0.12 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.12 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.12 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.12 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.12 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.12 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.12 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 17 | 0.12 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 17 | 0.12 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 17 | 0.12 |
| (1,1373) | 1:A:38:MET:H | 1:A:38:MET:HE1 | 2 | 0.12 |
| (1,1373) | 1:A:38:MET:H | 1:A:38:MET:HE2 | 2 | 0.12 |
| (1,1373) | 1:A:38:MET:H | 1:A:38:MET:HE3 | 2 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD21 | 12 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD22 | 12 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD23 | 12 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD21 | 12 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD22 | 12 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD23 | 12 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD21 | 12 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD22 | 12 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD23 | 12 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD21 | 17 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD22 | 17 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD23 | 17 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD21 | 17 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD22 | 17 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD23 | 17 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD21 | 17 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD22 | 17 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD23 | 17 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD21 | 18 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD22 | 18 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD23 | 18 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD21 | 18 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD22 | 18 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD23 | 18 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD21 | 18 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD22 | 18 | 0.12 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD23 | 18 | 0.12 |
| (1,1342) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:102:ALA:HA | 1 | 0.12 |
| (1,1342) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:102:ALA:HA | 1 | 0.12 |
| (1,1342) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:102:ALA:HA | 1 | 0.12 |
| (1,1296) | 1:A:104:ALA:HB1 | 1:A:105:LYS:HE2 | 1 | 0.12 |
| (1,1296) | 1:A:104:ALA:HB1 | 1:A:105:LYS:HE3 | 1 | 0.12 |
| (1,1296) | 1:A:104:ALA:HB2 | 1:A:105:LYS:HE2 | 1 | 0.12 |
| (1,1296) | 1:A:104:ALA:HB2 | 1:A:105:LYS:HE3 | 1 | 0.12 |
| (1,1296) | 1:A:104:ALA:HB3 | 1:A:105:LYS:HE2 | 1 | 0.12 |
| (1,1296) | 1:A:104:ALA:HB3 | 1:A:105:LYS:HE3 | 1 | 0.12 |
| (1,1278) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:HA | 13 | 0.12 |
| (1,1219) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:113:ALA:HB1 | 1 | 0.12 |
| (1,1219) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:113:ALA:HB2 | 1 | 0.12 |
| (1,1219) | 1:A:11:ARG:HD2 | 1:A:113:ALA:HB3 | 1 | 0.12 |
| (1,1219) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:113:ALA:HB1 | 1 | 0.12 |
| (1,1219) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:113:ALA:HB2 | 1 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1219) | 1:A:11:ARG:HD3 | 1:A:113:ALA:HB3 | 1 | 0.12 |
| (1,1180) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:14:LEU:HA | 15 | 0.12 |
| (1,1180) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:14:LEU:HA | 15 | 0.12 |
| (1,1180) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:14:LEU:HA | 15 | 0.12 |
| (1,1164) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:30:GLU:HA | 3 | 0.12 |
| (1,1164) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:30:GLU:HA | 3 | 0.12 |
| (1,1164) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:30:GLU:HA | 3 | 0.12 |
| (1,1164) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:30:GLU:HA | 12 | 0.12 |
| (1,1164) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:30:GLU:HA | 12 | 0.12 |
| (1,1164) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:30:GLU:HA | 12 | 0.12 |
| (1,1164) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:30:GLU:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1164) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:30:GLU:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1164) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:30:GLU:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:7:LEU:HD11 | 13 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:7:LEU:HD12 | 13 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:7:LEU:HD13 | 13 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:7:LEU:HD11 | 13 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:7:LEU:HD12 | 13 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:7:LEU:HD13 | 13 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:7:LEU:HD11 | 13 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:7:LEU:HD12 | 13 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:7:LEU:HD13 | 13 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:7:LEU:HD11 | 19 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:7:LEU:HD12 | 19 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:7:LEU:HD13 | 19 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:7:LEU:HD11 | 19 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:7:LEU:HD12 | 19 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:7:LEU:HD13 | 19 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:7:LEU:HD11 | 19 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:7:LEU:HD12 | 19 | 0.12 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:7:LEU:HD13 | 19 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG21 | 1:A:96:ALA:HB1 | 2 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG21 | 1:A:96:ALA:HB2 | 2 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG21 | 1:A:96:ALA:HB3 | 2 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG22 | 1:A:96:ALA:HB1 | 2 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG22 | 1:A:96:ALA:HB2 | 2 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG22 | 1:A:96:ALA:HB3 | 2 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG23 | 1:A:96:ALA:HB1 | 2 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG23 | 1:A:96:ALA:HB2 | 2 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG23 | 1:A:96:ALA:HB3 | 2 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG21 | 1:A:96:ALA:HB1 | 16 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG21 | 1:A:96:ALA:HB2 | 16 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG21 | 1:A:96:ALA:HB3 | 16 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG22 | 1:A:96:ALA:HB1 | 16 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG22 | 1:A:96:ALA:HB2 | 16 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG22 | 1:A:96:ALA:HB3 | 16 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG23 | 1:A:96:ALA:HB1 | 16 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG23 | 1:A:96:ALA:HB2 | 16 | 0.12 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG23 | 1:A:96:ALA:HB3 | 16 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 8 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 8 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 8 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 8 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 8 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 8 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 8 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 8 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 8 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 16 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 16 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 16 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 16 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 16 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 16 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 16 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 16 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 16 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 19 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 19 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 19 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 19 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 19 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 19 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 19 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 19 | 0.12 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 19 | 0.12 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HG2 | 10 | 0.12 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HG2 | 10 | 0.12 |
| (1,1070) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HG2 | 10 | 0.12 |
| (1,1060) | 1:A:46:ARG:HB3 | 1:A:66:THR:HG21 | 18 | 0.12 |
| (1,1060) | 1:A:46:ARG:HB3 | 1:A:66:THR:HG22 | 18 | 0.12 |
| (1,1060) | 1:A:46:ARG:HB3 | 1:A:66:THR:HG23 | 18 | 0.12 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG11 | 2 | 0.12 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG12 | 2 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG13 | 2 | 0.12 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG11 | 2 | 0.12 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG12 | 2 | 0.12 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG13 | 2 | 0.12 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG11 | 2 | 0.12 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG12 | 2 | 0.12 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG13 | 2 | 0.12 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG11 | 5 | 0.12 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG12 | 5 | 0.12 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG13 | 5 | 0.12 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG11 | 5 | 0.12 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG12 | 5 | 0.12 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG13 | 5 | 0.12 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG11 | 5 | 0.12 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG12 | 5 | 0.12 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG13 | 5 | 0.12 |
| (1,982) | 1:A:42:SER:HB3 | 1:A:43:MET:H | 1 | 0.11 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:82:ILE:H | 9 | 0.11 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:82:ILE:H | 9 | 0.11 |
| (1,972) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:82:ILE:H | 9 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD11 | 1:A:87:LYS:HA | 2 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD12 | 1:A:87:LYS:HA | 2 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD13 | 1:A:87:LYS:HA | 2 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD21 | 1:A:87:LYS:HA | 2 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD22 | 1:A:87:LYS:HA | 2 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD23 | 1:A:87:LYS:HA | 2 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD11 | 1:A:87:LYS:HA | 9 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD12 | 1:A:87:LYS:HA | 9 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD13 | 1:A:87:LYS:HA | 9 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD21 | 1:A:87:LYS:HA | 9 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD22 | 1:A:87:LYS:HA | 9 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD23 | 1:A:87:LYS:HA | 9 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD11 | 1:A:87:LYS:HA | 10 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD12 | 1:A:87:LYS:HA | 10 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD13 | 1:A:87:LYS:HA | 10 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD21 | 1:A:87:LYS:HA | 10 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD22 | 1:A:87:LYS:HA | 10 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD23 | 1:A:87:LYS:HA | 10 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD11 | 1:A:87:LYS:HA | 19 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD12 | 1:A:87:LYS:HA | 19 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD13 | 1:A:87:LYS:HA | 19 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD21 | 1:A:87:LYS:HA | 19 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|------------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD22 | 1:A:87:LYS:HA | 19 | 0.11 |
| (1,867) | 1:A:63:LEU:HD23 | 1:A:87:LYS:HA | 19 | 0.11 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD21 | 1:A:109:THR:H | 9 | 0.11 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD22 | 1:A:109:THR:H | 9 | 0.11 |
| (1,858) | 1:A:108:LEU:HD23 | 1:A:109:THR:H | 9 | 0.11 |
| (1,825) | 1:A:84:GLU:HA | 1:A:87:LYS:HG2 | 10 | 0.11 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD21 | 16 | 0.11 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD22 | 16 | 0.11 |
| (1,800) | 1:A:74:GLN:HE22 | 1:A:78:LEU:HD23 | 16 | 0.11 |
| (1,775) | 1:A:94:LEU:HD21 | 1:A:95:THR:HA | 3 | 0.11 |
| (1,775) | 1:A:94:LEU:HD22 | 1:A:95:THR:HA | 3 | 0.11 |
| (1,775) | 1:A:94:LEU:HD23 | 1:A:95:THR:HA | 3 | 0.11 |
| (1,775) | 1:A:94:LEU:HD21 | 1:A:95:THR:HA | 5 | 0.11 |
| (1,775) | 1:A:94:LEU:HD22 | 1:A:95:THR:HA | 5 | 0.11 |
| (1,775) | 1:A:94:LEU:HD23 | 1:A:95:THR:HA | 5 | 0.11 |
| (1,775) | 1:A:94:LEU:HD21 | 1:A:95:THR:HA | 15 | 0.11 |
| (1,775) | 1:A:94:LEU:HD22 | 1:A:95:THR:HA | 15 | 0.11 |
| (1,775) | 1:A:94:LEU:HD23 | 1:A:95:THR:HA | 15 | 0.11 |
| (1,775) | 1:A:94:LEU:HD21 | 1:A:95:THR:HA | 17 | 0.11 |
| (1,775) | 1:A:94:LEU:HD22 | 1:A:95:THR:HA | 17 | 0.11 |
| (1,775) | 1:A:94:LEU:HD23 | 1:A:95:THR:HA | 17 | 0.11 |
| (1,749) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:99:LEU:HG | 2 | 0.11 |
| (1,749) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:99:LEU:HG | 2 | 0.11 |
| (1,749) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:99:LEU:HG | 2 | 0.11 |
| (1,744) | 1:A:72:ASN:HB2 | 1:A:75:LEU:HG | 5 | 0.11 |
| (1,744) | 1:A:72:ASN:HB3 | 1:A:75:LEU:HG | 5 | 0.11 |
| (1,702) | 1:A:37:MET:HB2 | 1:A:51:GLY:H | 11 | 0.11 |
| (1,702) | 1:A:37:MET:HB3 | 1:A:51:GLY:H | 11 | 0.11 |
| (1,666) | 1:A:3:THR:HB | 1:A:4:PRO:HG3 | 13 | 0.11 |
| (1,590) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:105:LYS:HE2 | 12 | 0.11 |
| (1,590) | 1:A:84:GLU:HB2 | 1:A:105:LYS:HE3 | 12 | 0.11 |
| (1,582) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,582) | 1:A:67:ARG:H | 1:A:67:ARG:HB3 | 12 | 0.11 |
| (1,565) | 1:A:1:MET:HG3 | 1:A:3:THR:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,565) | 1:A:1:MET:HG3 | 1:A:3:THR:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,565) | 1:A:1:MET:HG3 | 1:A:3:THR:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,530) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:85:MET:HG3 | 12 | 0.11 |
| (1,530) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:85:MET:HG3 | 12 | 0.11 |
| (1,530) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:85:MET:HG3 | 12 | 0.11 |
| (1,515) | 1:A:73:PRO:HB3 | 1:A:74:GLN:H | 1 | 0.11 |
| (1,506) | 1:A:68:MET:H | 1:A:68:MET:HG2 | 14 | 0.11 |
| (1,506) | 1:A:68:MET:H | 1:A:68:MET:HG2 | 18 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:106:GLN:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:106:GLN:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,498) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:106:GLN:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,469) | 1:A:25:ASP:HB2 | 1:A:26:LYS:HB2 | 18 | 0.11 |
| (1,469) | 1:A:25:ASP:HB3 | 1:A:26:LYS:HB2 | 18 | 0.11 |
| (1,436) | 1:A:68:MET:H | 1:A:68:MET:HB2 | 4 | 0.11 |
| (1,436) | 1:A:68:MET:H | 1:A:68:MET:HB2 | 9 | 0.11 |
| (1,436) | 1:A:68:MET:H | 1:A:68:MET:HB2 | 10 | 0.11 |
| (1,431) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:HB | 15 | 0.11 |
| (1,431) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:HB | 15 | 0.11 |
| (1,431) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:HB | 15 | 0.11 |
| (1,431) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:92:VAL:HB | 15 | 0.11 |
| (1,431) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:92:VAL:HB | 15 | 0.11 |
| (1,431) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:92:VAL:HB | 15 | 0.11 |
| (1,380) | 1:A:51:GLY:HA3 | 1:A:52:LYS:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,359) | 1:A:13:VAL:H | 1:A:111:LYS:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,344) | 1:A:35:GLU:HG2 | 1:A:36:LYS:HG2 | 2 | 0.11 |
| (1,344) | 1:A:35:GLU:HG2 | 1:A:36:LYS:HG3 | 2 | 0.11 |
| (1,344) | 1:A:35:GLU:HG3 | 1:A:36:LYS:HG2 | 2 | 0.11 |
| (1,344) | 1:A:35:GLU:HG3 | 1:A:36:LYS:HG3 | 2 | 0.11 |
| (1,344) | 1:A:35:GLU:HG2 | 1:A:36:LYS:HG2 | 13 | 0.11 |
| (1,344) | 1:A:35:GLU:HG2 | 1:A:36:LYS:HG3 | 13 | 0.11 |
| (1,344) | 1:A:35:GLU:HG3 | 1:A:36:LYS:HG2 | 13 | 0.11 |
| (1,344) | 1:A:35:GLU:HG3 | 1:A:36:LYS:HG3 | 13 | 0.11 |
| (1,340) | 1:A:35:GLU:HG2 | 1:A:36:LYS:H | 13 | 0.11 |
| (1,340) | 1:A:35:GLU:HG3 | 1:A:36:LYS:H | 13 | 0.11 |
| (1,240) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,240) | 1:A:60:ALA:H | 1:A:86:LEU:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,2194) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:33:PHE:HZ | 11 | 0.11 |
| (1,2194) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:33:PHE:HZ | 11 | 0.11 |
| (1,2194) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:33:PHE:HZ | 11 | 0.11 |
| (1,2174) | 1:A:47:PHE:HD1 | 1:A:63:LEU:HD11 | 4 | 0.11 |
| (1,2174) | 1:A:47:PHE:HD1 | 1:A:63:LEU:HD12 | 4 | 0.11 |
| (1,2174) | 1:A:47:PHE:HD1 | 1:A:63:LEU:HD13 | 4 | 0.11 |
| (1,2174) | 1:A:47:PHE:HD2 | 1:A:63:LEU:HD11 | 4 | 0.11 |
| (1,2174) | 1:A:47:PHE:HD2 | 1:A:63:LEU:HD12 | 4 | 0.11 |
| (1,2174) | 1:A:47:PHE:HD2 | 1:A:63:LEU:HD13 | 4 | 0.11 |
| (1,2103) | 1:A:8:GLN:HG2 | 1:A:37:MET:H | 10 | 0.11 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG21 | 4 | 0.11 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG22 | 4 | 0.11 |
| (1,2072) | 1:A:103:THR:H | 1:A:103:THR:HG23 | 4 | 0.11 |
| (1,2060) | 1:A:8:GLN:H | 1:A:8:GLN:HG3 | 11 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,2044) | 1:A:7:LEU:H | 1:A:8:GLN:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,202) | 1:A:76:ASN:HA | 1:A:79:ASP:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB2 | 1:A:26:LYS:HG2 | 17 | 0.11 |
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB2 | 1:A:26:LYS:HG3 | 17 | 0.11 |
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB3 | 1:A:26:LYS:HG2 | 17 | 0.11 |
| (1,189) | 1:A:25:ASP:HB3 | 1:A:26:LYS:HG3 | 17 | 0.11 |
| (1,1874) | 1:A:110:TYR:HB2 | 1:A:111:LYS:H | 10 | 0.11 |
| (1,1825) | 1:A:65:MET:H | 1:A:65:MET:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,1800) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:95:THR:H | 3 | 0.11 |
| (1,1800) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:95:THR:H | 3 | 0.11 |
| (1,1800) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:95:THR:H | 3 | 0.11 |
| (1,1800) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:95:THR:H | 10 | 0.11 |
| (1,1800) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:95:THR:H | 10 | 0.11 |
| (1,1800) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:95:THR:H | 10 | 0.11 |
| (1,1800) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:95:THR:H | 14 | 0.11 |
| (1,1800) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:95:THR:H | 14 | 0.11 |
| (1,1800) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:95:THR:H | 14 | 0.11 |
| (1,1800) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:95:THR:H | 16 | 0.11 |
| (1,1800) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:95:THR:H | 16 | 0.11 |
| (1,1800) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:95:THR:H | 16 | 0.11 |
| (1,180) | 1:A:12:PHE:HB3 | 1:A:31:ILE:H | 3 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD21 | 4 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD22 | 4 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD23 | 4 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD21 | 17 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD22 | 17 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD23 | 17 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD21 | 19 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD22 | 19 | 0.11 |
| (1,1785) | 1:A:91:GLN:H | 1:A:101:LEU:HD23 | 19 | 0.11 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE2 | 3 | 0.11 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE3 | 3 | 0.11 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE2 | 3 | 0.11 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE3 | 3 | 0.11 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE2 | 3 | 0.11 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE3 | 3 | 0.11 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE2 | 19 | 0.11 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:111:LYS:HE3 | 19 | 0.11 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE2 | 19 | 0.11 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:111:LYS:HE3 | 19 | 0.11 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE2 | 19 | 0.11 |
| (1,174) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:111:LYS:HE3 | 19 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,165) | 1:A:45:ASN:HB2 | 1:A:67:ARG:HA | 7 | 0.11 |
| (1,1613) | 1:A:71:ALA:HA | 1:A:72:ASN:HB2 | 18 | 0.11 |
| (1,1613) | 1:A:71:ALA:HA | 1:A:72:ASN:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,1577) | 1:A:30:GLU:HA | 1:A:110:TYR:HE1 | 17 | 0.11 |
| (1,1577) | 1:A:30:GLU:HA | 1:A:110:TYR:HE2 | 17 | 0.11 |
| (1,1559) | 1:A:63:LEU:HD11 | 1:A:65:MET:HA | 17 | 0.11 |
| (1,1559) | 1:A:63:LEU:HD12 | 1:A:65:MET:HA | 17 | 0.11 |
| (1,1559) | 1:A:63:LEU:HD13 | 1:A:65:MET:HA | 17 | 0.11 |
| (1,1559) | 1:A:63:LEU:HD21 | 1:A:65:MET:HA | 17 | 0.11 |
| (1,1559) | 1:A:63:LEU:HD22 | 1:A:65:MET:HA | 17 | 0.11 |
| (1,1559) | 1:A:63:LEU:HD23 | 1:A:65:MET:HA | 17 | 0.11 |
| (1,1559) | 1:A:63:LEU:HD11 | 1:A:65:MET:HA | 18 | 0.11 |
| (1,1559) | 1:A:63:LEU:HD12 | 1:A:65:MET:HA | 18 | 0.11 |
| (1,1559) | 1:A:63:LEU:HD13 | 1:A:65:MET:HA | 18 | 0.11 |
| (1,1559) | 1:A:63:LEU:HD21 | 1:A:65:MET:HA | 18 | 0.11 |
| (1,1559) | 1:A:63:LEU:HD22 | 1:A:65:MET:HA | 18 | 0.11 |
| (1,1559) | 1:A:63:LEU:HD23 | 1:A:65:MET:HA | 18 | 0.11 |
| (1,1553) | 1:A:82:ILE:HD11 | 1:A:85:MET:HA | 17 | 0.11 |
| (1,1553) | 1:A:82:ILE:HD12 | 1:A:85:MET:HA | 17 | 0.11 |
| (1,1553) | 1:A:82:ILE:HD13 | 1:A:85:MET:HA | 17 | 0.11 |
| (1,1462) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:43:MET:HE1 | 6 | 0.11 |
| (1,1462) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:43:MET:HE2 | 6 | 0.11 |
| (1,1462) | 1:A:31:ILE:HG21 | 1:A:43:MET:HE3 | 6 | 0.11 |
| (1,1462) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:43:MET:HE1 | 6 | 0.11 |
| (1,1462) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:43:MET:HE2 | 6 | 0.11 |
| (1,1462) | 1:A:31:ILE:HG22 | 1:A:43:MET:HE3 | 6 | 0.11 |
| (1,1462) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:43:MET:HE1 | 6 | 0.11 |
| (1,1462) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:43:MET:HE2 | 6 | 0.11 |
| (1,1462) | 1:A:31:ILE:HG23 | 1:A:43:MET:HE3 | 6 | 0.11 |
| (1,142) | 1:A:34:GLY:HA3 | 1:A:35:GLU:HG2 | 9 | 0.11 |
| (1,142) | 1:A:34:GLY:HA3 | 1:A:35:GLU:HG3 | 9 | 0.11 |
| (1,142) | 1:A:34:GLY:HA3 | 1:A:35:GLU:HG2 | 13 | 0.11 |
| (1,142) | 1:A:34:GLY:HA3 | 1:A:35:GLU:HG3 | 13 | 0.11 |
| (1,1410) | 1:A:88:GLU:HA | 1:A:103:THR:HG21 | 10 | 0.11 |
| (1,1410) | 1:A:88:GLU:HA | 1:A:103:THR:HG22 | 10 | 0.11 |
| (1,1410) | 1:A:88:GLU:HA | 1:A:103:THR:HG23 | 10 | 0.11 |
| (1,1410) | 1:A:88:GLU:HA | 1:A:103:THR:HG21 | 11 | 0.11 |
| (1,1410) | 1:A:88:GLU:HA | 1:A:103:THR:HG22 | 11 | 0.11 |
| (1,1410) | 1:A:88:GLU:HA | 1:A:103:THR:HG23 | 11 | 0.11 |
| (1,1410) | 1:A:88:GLU:HA | 1:A:103:THR:HG21 | 16 | 0.11 |
| (1,1410) | 1:A:88:GLU:HA | 1:A:103:THR:HG22 | 16 | 0.11 |
| (1,1410) | 1:A:88:GLU:HA | 1:A:103:THR:HG23 | 16 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1410) | 1:A:88:GLU:HA | 1:A:103:THR:HG21 | 17 | 0.11 |
| (1,1410) | 1:A:88:GLU:HA | 1:A:103:THR:HG22 | 17 | 0.11 |
| (1,1410) | 1:A:88:GLU:HA | 1:A:103:THR:HG23 | 17 | 0.11 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD11 | 2 | 0.11 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD12 | 2 | 0.11 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD13 | 2 | 0.11 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD21 | 2 | 0.11 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD22 | 2 | 0.11 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:53:LEU:HD23 | 2 | 0.11 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD11 | 2 | 0.11 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD12 | 2 | 0.11 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD13 | 2 | 0.11 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD21 | 2 | 0.11 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD22 | 2 | 0.11 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:53:LEU:HD23 | 2 | 0.11 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD11 | 2 | 0.11 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD12 | 2 | 0.11 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD13 | 2 | 0.11 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD21 | 2 | 0.11 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD22 | 2 | 0.11 |
| (1,1403) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:53:LEU:HD23 | 2 | 0.11 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 0.11 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 0.11 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 0.11 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 0.11 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 0.11 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 0.11 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD21 | 1 | 0.11 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD22 | 1 | 0.11 |
| (1,1402) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:58:LEU:HD23 | 1 | 0.11 |
| (1,1395) | 1:A:37:MET:HE1 | 1:A:52:LYS:HA | 14 | 0.11 |
| (1,1395) | 1:A:37:MET:HE2 | 1:A:52:LYS:HA | 14 | 0.11 |
| (1,1395) | 1:A:37:MET:HE3 | 1:A:52:LYS:HA | 14 | 0.11 |
| (1,1390) | 1:A:37:MET:H | 1:A:37:MET:HE1 | 11 | 0.11 |
| (1,1390) | 1:A:37:MET:H | 1:A:37:MET:HE2 | 11 | 0.11 |
| (1,1390) | 1:A:37:MET:H | 1:A:37:MET:HE3 | 11 | 0.11 |
| (1,1373) | 1:A:38:MET:H | 1:A:38:MET:HE1 | 12 | 0.11 |
| (1,1373) | 1:A:38:MET:H | 1:A:38:MET:HE2 | 12 | 0.11 |
| (1,1373) | 1:A:38:MET:H | 1:A:38:MET:HE3 | 12 | 0.11 |
| (1,1365) | 1:A:47:PHE:HB2 | 1:A:65:MET:HE1 | 18 | 0.11 |
| (1,1365) | 1:A:47:PHE:HB2 | 1:A:65:MET:HE2 | 18 | 0.11 |
| (1,1365) | 1:A:47:PHE:HB2 | 1:A:65:MET:HE3 | 18 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1358) | 1:A:65:MET:HE1 | 1:A:66:THR:H | 7 | 0.11 |
| (1,1358) | 1:A:65:MET:HE2 | 1:A:66:THR:H | 7 | 0.11 |
| (1,1358) | 1:A:65:MET:HE3 | 1:A:66:THR:H | 7 | 0.11 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE1 | 9 | 0.11 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE2 | 9 | 0.11 |
| (1,1355) | 1:A:45:ASN:HD22 | 1:A:65:MET:HE3 | 9 | 0.11 |
| (1,1353) | 1:A:69:MET:HE1 | 1:A:76:ASN:HD22 | 9 | 0.11 |
| (1,1353) | 1:A:69:MET:HE2 | 1:A:76:ASN:HD22 | 9 | 0.11 |
| (1,1353) | 1:A:69:MET:HE3 | 1:A:76:ASN:HD22 | 9 | 0.11 |
| (1,1351) | 1:A:69:MET:HE1 | 1:A:70:CYS:H | 1 | 0.11 |
| (1,1351) | 1:A:69:MET:HE2 | 1:A:70:CYS:H | 1 | 0.11 |
| (1,1351) | 1:A:69:MET:HE3 | 1:A:70:CYS:H | 1 | 0.11 |
| (1,1351) | 1:A:69:MET:HE1 | 1:A:70:CYS:H | 9 | 0.11 |
| (1,1351) | 1:A:69:MET:HE2 | 1:A:70:CYS:H | 9 | 0.11 |
| (1,1351) | 1:A:69:MET:HE3 | 1:A:70:CYS:H | 9 | 0.11 |
| (1,1351) | 1:A:69:MET:HE1 | 1:A:70:CYS:H | 14 | 0.11 |
| (1,1351) | 1:A:69:MET:HE2 | 1:A:70:CYS:H | 14 | 0.11 |
| (1,1351) | 1:A:69:MET:HE3 | 1:A:70:CYS:H | 14 | 0.11 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD21 | 10 | 0.11 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD22 | 10 | 0.11 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:101:LEU:HD23 | 10 | 0.11 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD21 | 10 | 0.11 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD22 | 10 | 0.11 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:101:LEU:HD23 | 10 | 0.11 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD21 | 10 | 0.11 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD22 | 10 | 0.11 |
| (1,1350) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:101:LEU:HD23 | 10 | 0.11 |
| (1,1344) | 1:A:85:MET:HE1 | 1:A:103:THR:HB | 15 | 0.11 |
| (1,1344) | 1:A:85:MET:HE2 | 1:A:103:THR:HB | 15 | 0.11 |
| (1,1344) | 1:A:85:MET:HE3 | 1:A:103:THR:HB | 15 | 0.11 |
| (1,1340) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HE1 | 16 | 0.11 |
| (1,1340) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HE2 | 16 | 0.11 |
| (1,1340) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HE3 | 16 | 0.11 |
| (1,1340) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HE1 | 17 | 0.11 |
| (1,1340) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HE2 | 17 | 0.11 |
| (1,1340) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HE3 | 17 | 0.11 |
| (1,1340) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HE1 | 19 | 0.11 |
| (1,1340) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HE2 | 19 | 0.11 |
| (1,1340) | 1:A:85:MET:H | 1:A:85:MET:HE3 | 19 | 0.11 |
| (1,134) | 1:A:34:GLY:HA3 | 1:A:35:GLU:HB2 | 15 | 0.11 |
| (1,134) | 1:A:34:GLY:HA3 | 1:A:35:GLU:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,1326) | 1:A:46:ARG:HD2 | 1:A:68:MET:HE1 | 11 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1326) | 1:A:46:ARG:HD2 | 1:A:68:MET:HE2 | 11 | 0.11 |
| (1,1326) | 1:A:46:ARG:HD2 | 1:A:68:MET:HE3 | 11 | 0.11 |
| (1,1326) | 1:A:46:ARG:HD3 | 1:A:68:MET:HE1 | 11 | 0.11 |
| (1,1326) | 1:A:46:ARG:HD3 | 1:A:68:MET:HE2 | 11 | 0.11 |
| (1,1326) | 1:A:46:ARG:HD3 | 1:A:68:MET:HE3 | 11 | 0.11 |
| (1,1296) | 1:A:104:ALA:HB1 | 1:A:105:LYS:HE2 | 13 | 0.11 |
| (1,1296) | 1:A:104:ALA:HB1 | 1:A:105:LYS:HE3 | 13 | 0.11 |
| (1,1296) | 1:A:104:ALA:HB2 | 1:A:105:LYS:HE2 | 13 | 0.11 |
| (1,1296) | 1:A:104:ALA:HB2 | 1:A:105:LYS:HE3 | 13 | 0.11 |
| (1,1296) | 1:A:104:ALA:HB3 | 1:A:105:LYS:HE2 | 13 | 0.11 |
| (1,1296) | 1:A:104:ALA:HB3 | 1:A:105:LYS:HE3 | 13 | 0.11 |
| (1,1278) | 1:A:11:ARG:HG3 | 1:A:13:VAL:HA | 5 | 0.11 |
| (1,1276) | 1:A:82:ILE:HG21 | 1:A:86:LEU:HG | 12 | 0.11 |
| (1,1276) | 1:A:82:ILE:HG22 | 1:A:86:LEU:HG | 12 | 0.11 |
| (1,1276) | 1:A:82:ILE:HG23 | 1:A:86:LEU:HG | 12 | 0.11 |
| (1,1242) | 1:A:100:THR:HA | 1:A:101:LEU:HB3 | 11 | 0.11 |
| (1,1180) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:14:LEU:HA | 8 | 0.11 |
| (1,1180) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:14:LEU:HA | 8 | 0.11 |
| (1,1180) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:14:LEU:HA | 8 | 0.11 |
| (1,1180) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:14:LEU:HA | 13 | 0.11 |
| (1,1180) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:14:LEU:HA | 13 | 0.11 |
| (1,1180) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:14:LEU:HA | 13 | 0.11 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:110:TYR:HB2 | 18 | 0.11 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:110:TYR:HB2 | 18 | 0.11 |
| (1,1169) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:110:TYR:HB2 | 18 | 0.11 |
| (1,1164) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:30:GLU:HA | 4 | 0.11 |
| (1,1164) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:30:GLU:HA | 4 | 0.11 |
| (1,1164) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:30:GLU:HA | 4 | 0.11 |
| (1,1164) | 1:A:13:VAL:HG21 | 1:A:30:GLU:HA | 14 | 0.11 |
| (1,1164) | 1:A:13:VAL:HG22 | 1:A:30:GLU:HA | 14 | 0.11 |
| (1,1164) | 1:A:13:VAL:HG23 | 1:A:30:GLU:HA | 14 | 0.11 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:7:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:7:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG11 | 1:A:7:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:7:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:7:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG12 | 1:A:7:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:7:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:7:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (1,1147) | 1:A:2:VAL:HG13 | 1:A:7:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,1137) | 1:A:13:VAL:HG11 | 1:A:15:GLU:HA | 14 | 0.11 |
| (1,1137) | 1:A:13:VAL:HG12 | 1:A:15:GLU:HA | 14 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|------------------|----------|---------------|
| (1,1137) | 1:A:13:VAL:HG13 | 1:A:15:GLU:HA | 14 | 0.11 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG21 | 1:A:96:ALA:HB1 | 5 | 0.11 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG21 | 1:A:96:ALA:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG21 | 1:A:96:ALA:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG22 | 1:A:96:ALA:HB1 | 5 | 0.11 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG22 | 1:A:96:ALA:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG22 | 1:A:96:ALA:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG23 | 1:A:96:ALA:HB1 | 5 | 0.11 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG23 | 1:A:96:ALA:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,1127) | 1:A:95:THR:HG23 | 1:A:96:ALA:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:86:LEU:HD11 | 5 | 0.11 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:86:LEU:HD12 | 5 | 0.11 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG21 | 1:A:86:LEU:HD13 | 5 | 0.11 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:86:LEU:HD11 | 5 | 0.11 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:86:LEU:HD12 | 5 | 0.11 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG22 | 1:A:86:LEU:HD13 | 5 | 0.11 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:86:LEU:HD11 | 5 | 0.11 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:86:LEU:HD12 | 5 | 0.11 |
| (1,1124) | 1:A:39:ILE:HG23 | 1:A:86:LEU:HD13 | 5 | 0.11 |
| (1,1089) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HG21 | 5 | 0.11 |
| (1,1089) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HG22 | 5 | 0.11 |
| (1,1089) | 1:A:16:SER:HB3 | 1:A:109:THR:HG23 | 5 | 0.11 |
| (1,1073) | 1:A:53:LEU:HA | 1:A:54:SER:HB3 | 11 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:106:GLN:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:106:GLN:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:106:GLN:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:106:GLN:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:106:GLN:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:106:GLN:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:81:THR:HG21 | 1:A:106:GLN:HB2 | 19 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:81:THR:HG22 | 1:A:106:GLN:HB2 | 19 | 0.11 |
| (1,1071) | 1:A:81:THR:HG23 | 1:A:106:GLN:HB2 | 19 | 0.11 |
| (1,1068) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:5:GLU:HB2 | 9 | 0.11 |
| (1,1068) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:5:GLU:HB2 | 9 | 0.11 |
| (1,1068) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:5:GLU:HB2 | 9 | 0.11 |
| (1,1068) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:5:GLU:HB2 | 19 | 0.11 |
| (1,1068) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:5:GLU:HB2 | 19 | 0.11 |
| (1,1068) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:5:GLU:HB2 | 19 | 0.11 |
| (1,1064) | 1:A:3:THR:HG21 | 1:A:6:GLN:H | 12 | 0.11 |
| (1,1064) | 1:A:3:THR:HG22 | 1:A:6:GLN:H | 12 | 0.11 |
| (1,1064) | 1:A:3:THR:HG23 | 1:A:6:GLN:H | 12 | 0.11 |
| (1,1060) | 1:A:46:ARG:HB3 | 1:A:66:THR:HG21 | 17 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1060) | 1:A:46:ARG:HB3 | 1:A:66:THR:HG22 | 17 | 0.11 |
| (1,1060) | 1:A:46:ARG:HB3 | 1:A:66:THR:HG23 | 17 | 0.11 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG11 | 19 | 0.11 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG12 | 19 | 0.11 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:92:VAL:HG13 | 19 | 0.11 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG11 | 19 | 0.11 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG12 | 19 | 0.11 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:92:VAL:HG13 | 19 | 0.11 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG11 | 19 | 0.11 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG12 | 19 | 0.11 |
| (1,1043) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:92:VAL:HG13 | 19 | 0.11 |
| (1,1021) | 1:A:2:VAL:HG21 | 1:A:3:THR:H | 1 | 0.11 |
| (1,1021) | 1:A:2:VAL:HG22 | 1:A:3:THR:H | 1 | 0.11 |
| (1,1021) | 1:A:2:VAL:HG23 | 1:A:3:THR:H | 1 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 5 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 5 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 5 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 5 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 5 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 5 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 5 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 5 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 5 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 14 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 14 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 14 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 14 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 14 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 14 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 14 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 14 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 14 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD11 | 17 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD12 | 17 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD21 | 1:A:94:LEU:HD13 | 17 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD11 | 17 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD12 | 17 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD22 | 1:A:94:LEU:HD13 | 17 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD11 | 17 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD12 | 17 | 0.11 |
| (1,1016) | 1:A:7:LEU:HD23 | 1:A:94:LEU:HD13 | 17 | 0.11 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:HG21 | 18 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:HG22 | 18 | 0.11 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD11 | 1:A:92:VAL:HG23 | 18 | 0.11 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:HG21 | 18 | 0.11 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:HG22 | 18 | 0.11 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD12 | 1:A:92:VAL:HG23 | 18 | 0.11 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:HG21 | 18 | 0.11 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:HG22 | 18 | 0.11 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD13 | 1:A:92:VAL:HG23 | 18 | 0.11 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:92:VAL:HG21 | 18 | 0.11 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:92:VAL:HG22 | 18 | 0.11 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD21 | 1:A:92:VAL:HG23 | 18 | 0.11 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:92:VAL:HG21 | 18 | 0.11 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:92:VAL:HG22 | 18 | 0.11 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD22 | 1:A:92:VAL:HG23 | 18 | 0.11 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:92:VAL:HG21 | 18 | 0.11 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:92:VAL:HG22 | 18 | 0.11 |
| (1,1006) | 1:A:53:LEU:HD23 | 1:A:92:VAL:HG23 | 18 | 0.11 |

10 Dihedral-angle violation analysis

No dihedral-angle restraints found