



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 3, 2023 – 11:36 AM EDT

PDB ID : 6OFA
BMRB ID : 30597
Title : Wasabi Receptor Toxin
Authors : Lin King, J.V.; Kelly, M.J.S.; Julius, D.
Deposited on : 2019-03-28

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

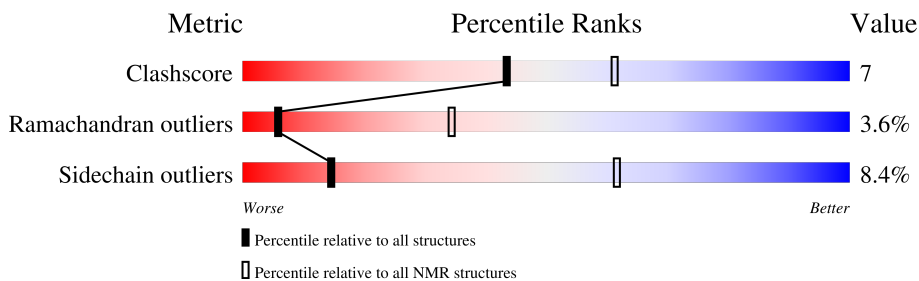
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 78%.

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 | 33 | 61% 21% • 15% |

2 Ensemble composition and analysis i

This entry contains 50 models. Model 8 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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:4-A:31 (28) | 0.42 | 8 |

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 6 clusters and 10 single-model clusters were found.

| Cluster number | Models |
|-----------------------|---|
| 1 | 1, 4, 6, 8, 9, 11, 14, 17, 25, 27, 29, 32, 34, 35, 36, 38, 42, 43, 46 |
| 2 | 19, 20, 21, 22, 26, 33, 41, 44, 45 |
| 3 | 5, 7, 23, 24, 28 |
| 4 | 16, 39, 49 |
| 5 | 2, 48 |
| 6 | 12, 50 |
| Single-model clusters | 3; 10; 13; 15; 18; 30; 31; 37; 40; 47 |

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 507 atoms, of which 242 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Wasabi Receptor Toxin.

| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | | Trace |
|-----|-------|----------|-------|-----|-----|----|----|---|-------|
| | | | Total | C | H | N | O | S | |
| 1 | A | 33 | 507 | 164 | 242 | 45 | 51 | 5 | 0 |

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outliers are shown as green connectors. Residues which are classified as ill-defined in the NMR ensemble, are shown in cyan with an underline colour-coded according to the previous scheme. Residues which were present in the experimental sample, but not modelled in the final structure are shown in grey.

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



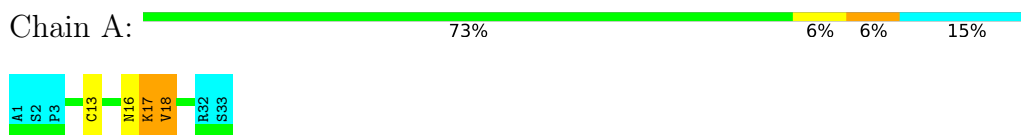
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



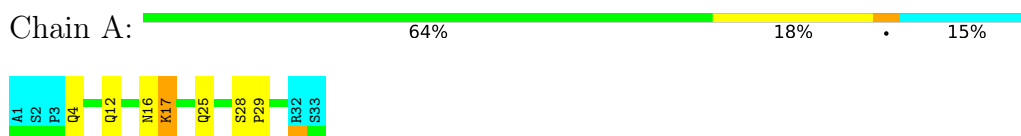
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



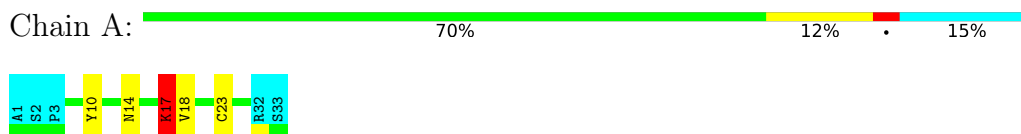
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



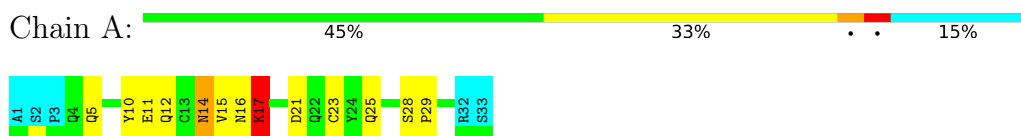
4.2.8 Score per residue for model 8 (medoid)

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



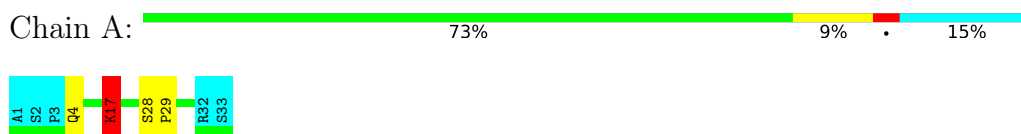
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



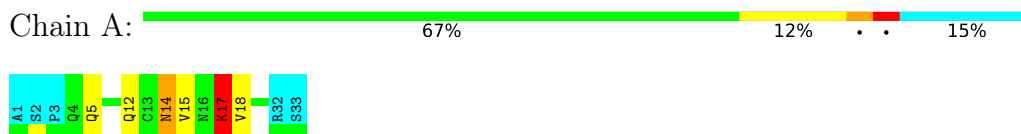
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



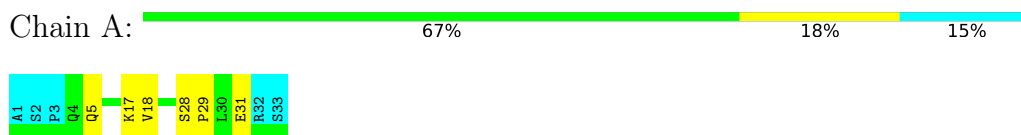
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



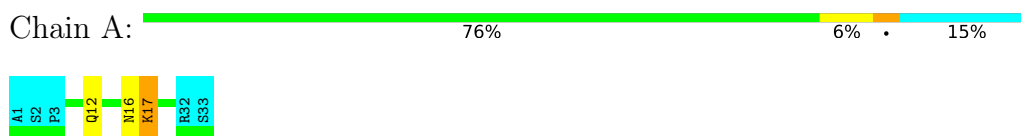
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



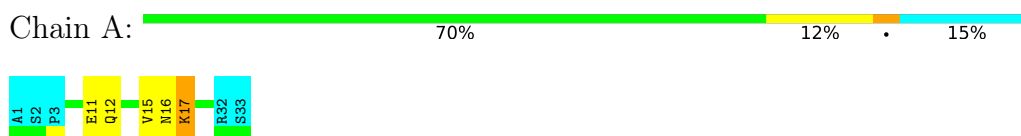
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



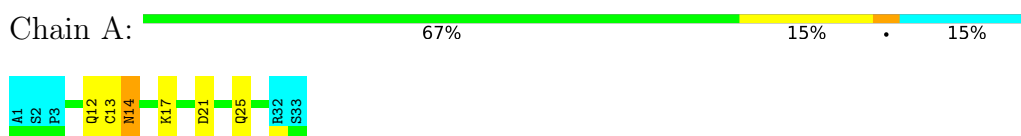
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



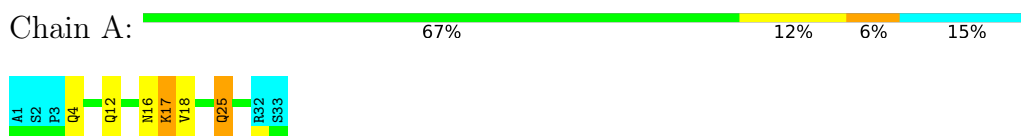
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



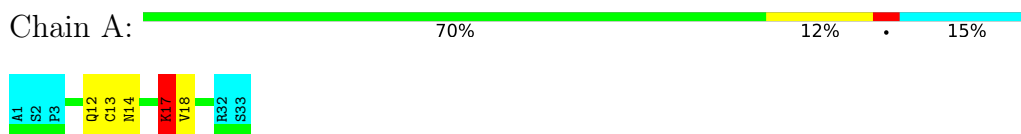
4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



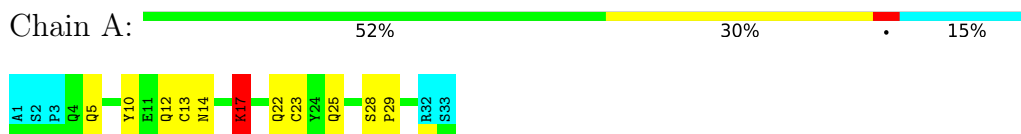
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.27 Score per residue for model 27

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



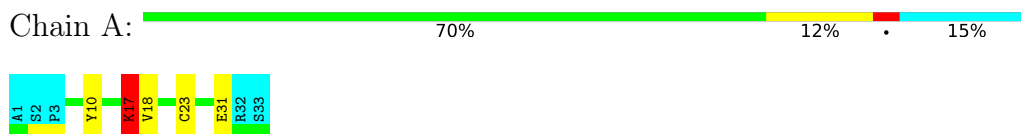
4.2.29 Score per residue for model 29

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



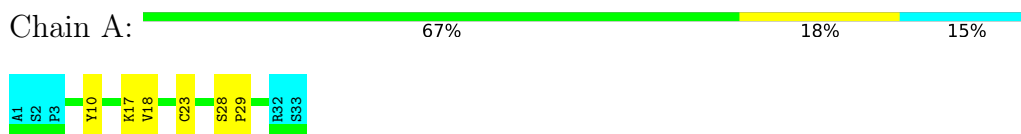
4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



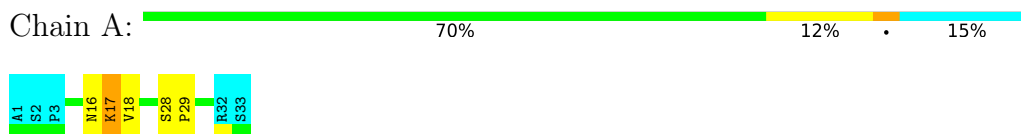
4.2.31 Score per residue for model 31

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



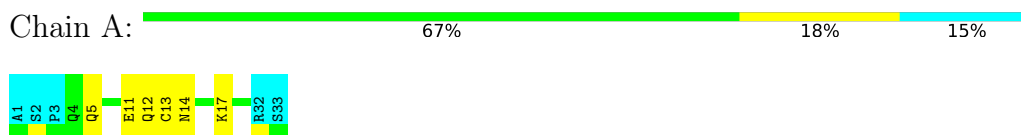
4.2.32 Score per residue for model 32

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.33 Score per residue for model 33

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.34 Score per residue for model 34

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



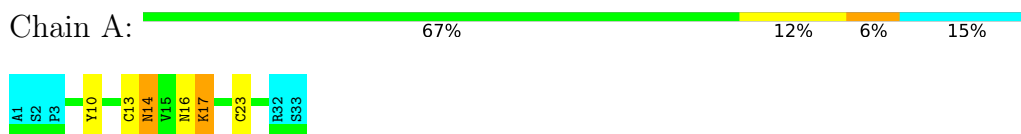
4.2.35 Score per residue for model 35

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



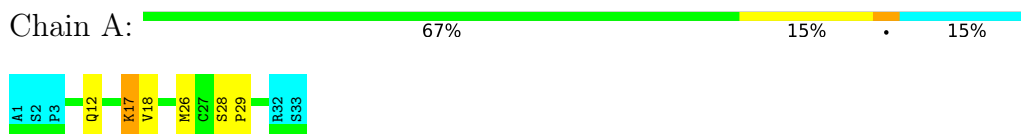
4.2.36 Score per residue for model 36

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



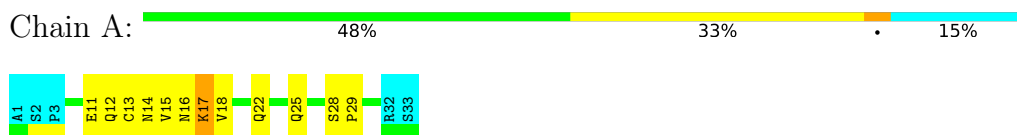
4.2.37 Score per residue for model 37

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



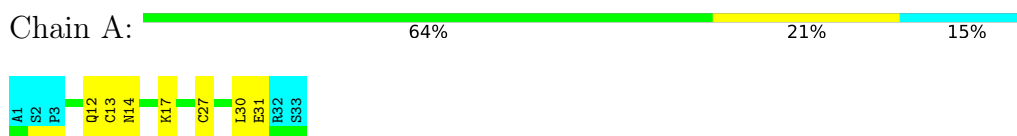
4.2.38 Score per residue for model 38

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.39 Score per residue for model 39

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



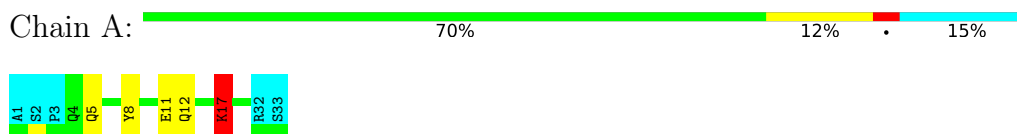
4.2.40 Score per residue for model 40

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



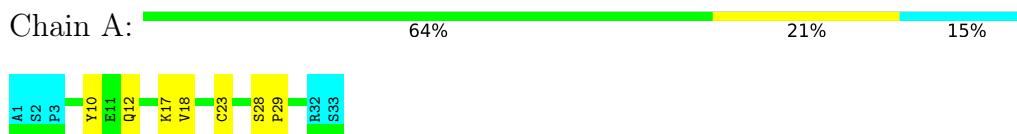
4.2.41 Score per residue for model 41

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



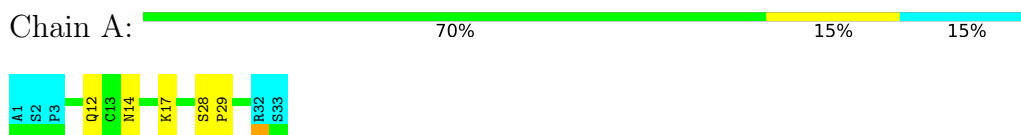
4.2.42 Score per residue for model 42

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.43 Score per residue for model 43

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



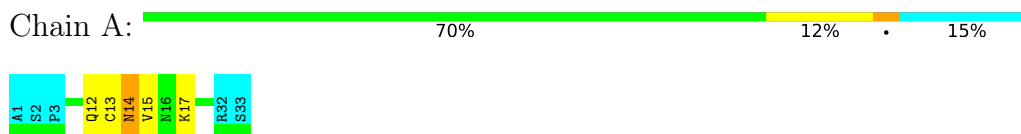
4.2.44 Score per residue for model 44

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



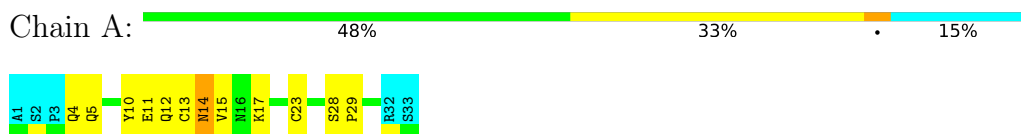
4.2.45 Score per residue for model 45

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.46 Score per residue for model 46

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.47 Score per residue for model 47

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



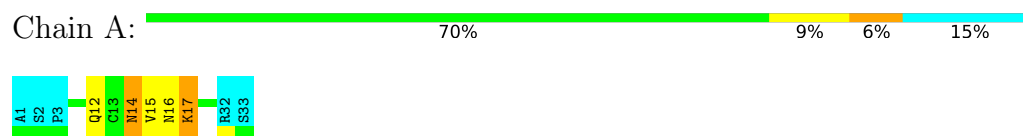
4.2.48 Score per residue for model 48

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



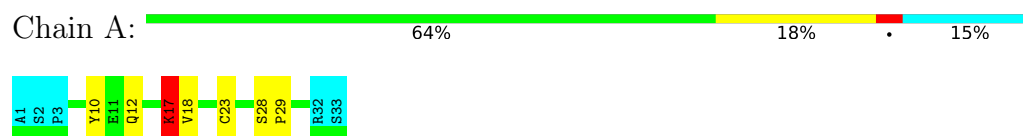
4.2.49 Score per residue for model 49

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



4.2.50 Score per residue for model 50

- Molecule 1: Wasabi Receptor Toxin



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 200 calculated structures, 50 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

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

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

| | |
|--|----------------|
| Chemical shift file(s) | working_cs.cif |
| Number of chemical shift lists | 1 |
| Total number of shifts | 331 |
| Number of shifts mapped to atoms | 331 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 78% |

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

There are no covalent bond-length or bond-angle outliers.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts 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 | 231 | 208 | 208 | 3±1 |
| All | All | 11550 | 10400 | 10400 | 154 |

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 7.

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

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:10:TYR:HA | 1:A:23:CYS:SG | 0.62 | 2.34 | 23 | 23 |
| 1:A:28:SER:OG | 1:A:29:PRO:HD3 | 0.60 | 1.96 | 38 | 32 |
| 1:A:14:ASN:HD22 | 1:A:15:VAL:N | 0.58 | 1.96 | 49 | 9 |
| 1:A:22:GLN:O | 1:A:25:GLN:HG2 | 0.53 | 2.04 | 38 | 3 |
| 1:A:8:TYR:O | 1:A:11:GLU:HG2 | 0.52 | 2.03 | 41 | 3 |
| 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:O | 0.52 | 2.05 | 5 | 10 |
| 1:A:16:ASN:O | 1:A:17:LYS:HB2 | 0.51 | 2.05 | 23 | 19 |
| 1:A:16:ASN:O | 1:A:17:LYS:HG3 | 0.51 | 2.05 | 13 | 3 |
| 1:A:18:VAL:HB | 1:A:22:GLN:OE1 | 0.50 | 2.06 | 47 | 2 |
| 1:A:11:GLU:O | 1:A:15:VAL:HG23 | 0.48 | 2.09 | 1 | 11 |
| 1:A:21:ASP:O | 1:A:25:GLN:HG3 | 0.48 | 2.08 | 8 | 3 |
| 1:A:17:LYS:O | 1:A:17:LYS:HD2 | 0.47 | 2.10 | 14 | 1 |
| 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:OE1 | 0.46 | 2.10 | 41 | 1 |
| 1:A:13:CYS:SG | 1:A:14:ASN:N | 0.44 | 2.91 | 16 | 15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|-----------------|-----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:SG | 0.44 | 2.52 | 40 | 1 |
| 1:A:27:CYS:O | 1:A:30:LEU:HB3 | 0.44 | 2.13 | 39 | 1 |
| 1:A:4:GLN:HE21 | 1:A:4:GLN:HA | 0.43 | 1.74 | 8 | 1 |
| 1:A:5:GLN:OE1 | 1:A:5:GLN:HA | 0.42 | 2.14 | 10 | 1 |
| 1:A:21:ASP:O | 1:A:25:GLN:HG2 | 0.42 | 2.14 | 9 | 1 |
| 1:A:26:MET:O | 1:A:29:PRO:HD2 | 0.42 | 2.15 | 37 | 1 |
| 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:12:GLN:HA | 0.42 | 1.75 | 44 | 1 |
| 1:A:17:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:N | 0.41 | 2.30 | 5 | 2 |
| 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:SG | 0.41 | 2.54 | 47 | 1 |
| 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 0.41 | 1.91 | 23 | 2 |
| 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HE21 | 0.41 | 1.76 | 24 | 2 |
| 1:A:28:SER:HB3 | 1:A:29:PRO:HD3 | 0.41 | 1.91 | 16 | 1 |
| 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:HD3 | 0.41 | 2.31 | 9 | 1 |
| 1:A:4:GLN:HA | 1:A:4:GLN:HE21 | 0.41 | 1.76 | 23 | 2 |
| 1:A:16:ASN:O | 1:A:17:LYS:HB3 | 0.40 | 2.16 | 9 | 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 | 28/33 (85%) | 25±1 (90±3%) | 2±1 (6±3%) | 1±0 (4±0%) | 6 | 34 |
| All | All | 1400/1650 (85%) | 1263 (90%) | 87 (6%) | 50 (4%) | 6 | 34 |

All 1 unique Ramachandran outliers are listed below.

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 17 | LYS | 50 |

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 | 27/31 (87%) | 25±1 (92±4%) | 2±1 (8±4%) | 14 | 61 |
| All | All | 1350/1550 (87%) | 1236 (92%) | 114 (8%) | 14 | 61 |

All 11 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 | 12 | GLN | 36 |
| 1 | A | 18 | VAL | 26 |
| 1 | A | 14 | ASN | 14 |
| 1 | A | 17 | LYS | 12 |
| 1 | A | 4 | GLN | 9 |
| 1 | A | 5 | GLN | 4 |
| 1 | A | 25 | GLN | 4 |
| 1 | A | 31 | GLU | 4 |
| 1 | A | 16 | ASN | 2 |
| 1 | A | 11 | GLU | 2 |
| 1 | A | 23 | CYS | 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

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 78% for the well-defined parts and 76% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: starch_output

7.1.1 Bookkeeping [i](#)

The following table shows the results of parsing the chemical shift list and reports the number of nuclei with statistically unusual chemical shifts.

| | |
|---|-----|
| Total number of shifts | 331 |
| Number of shifts mapped to atoms | 331 |
| 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 |
|------------------------|----------|---------------------------------|--------------------------|
| $^{13}\text{C}_\alpha$ | 27 | -3.31 ± 0.18 | Should be checked |
| $^{13}\text{C}_\beta$ | 33 | -2.59 ± 0.21 | Should be checked |
| $^{13}\text{C}'$ | 0 | — | None (insufficient data) |
| ^{15}N | 0 | — | None (insufficient data) |

7.1.3 Completeness of resonance assignments [i](#)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 78%, i.e. 290 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 373. 0 out of 3 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ^1H | ^{13}C | ^{15}N |
|-----------|---------------|---------------|-----------------|-----------------|
| Backbone | 76/136 (56%) | 54/54 (100%) | 22/56 (39%) | 0/26 (0%) |
| Sidechain | 180/200 (90%) | 126/127 (99%) | 54/64 (84%) | 0/9 (0%) |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| | Total | ¹ H | ¹³ C | ¹⁵ N |
|----------|---------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Aromatic | 34/37 (92%) | 17/17 (100%) | 17/20 (85%) | 0/0 (—%) |
| Overall | 290/373 (78%) | 197/198 (99%) | 93/140 (66%) | 0/35 (0%) |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 76%, i.e. 331 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 433. 0 out of 3 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ¹ H | ¹³ C | ¹⁵ N |
|-----------|---------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone | 89/159 (56%) | 62/63 (98%) | 27/66 (41%) | 0/30 (0%) |
| Sidechain | 208/237 (88%) | 145/151 (96%) | 63/74 (85%) | 0/12 (0%) |
| Aromatic | 34/37 (92%) | 17/17 (100%) | 17/20 (85%) | 0/0 (—%) |
| Overall | 331/433 (76%) | 224/231 (97%) | 107/160 (67%) | 0/42 (0%) |

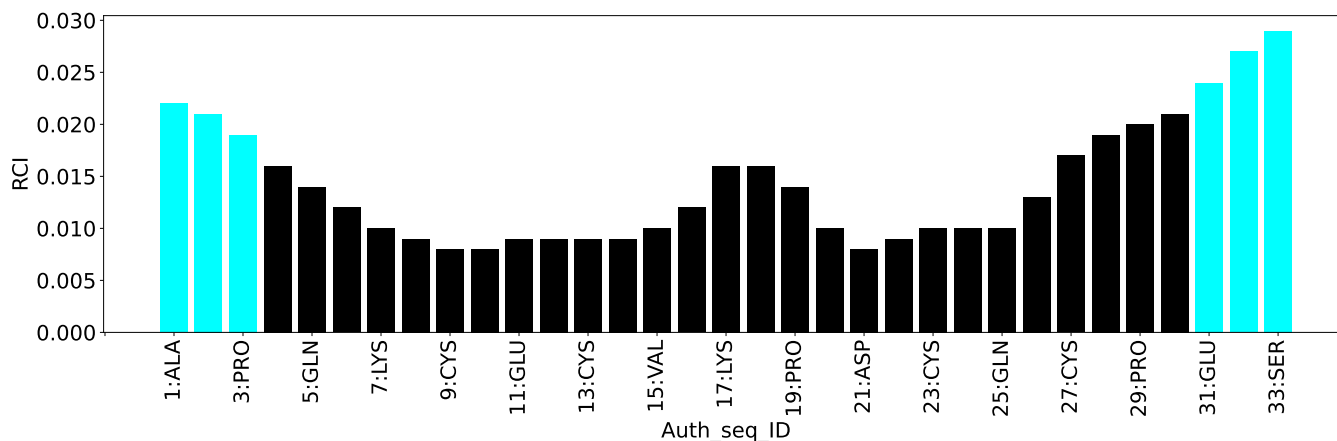
7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

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 | 1996 |
| Intra-residue ($ i-j =0$) | 1222 |
| Sequential ($ i-j =1$) | 416 |
| Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$) | 250 |
| Long range ($ i-j \geq 5$) | 106 |
| Inter-chain | 0 |
| Hydrogen bond restraints | 0 |
| Disulfide bond restraints | 2 |
| Total dihedral-angle restraints | 58 |
| Number of unmapped restraints | 0 |
| Number of restraints per residue | 62.2 |
| Number of long range restraints per residue ¹ | 3.3 |

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) | 154.7 | 0.2 |
| 0.2-0.5 (Medium) | 242.3 | 0.5 |
| >0.5 (Large) | 59.6 | 3.15 |

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

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

| Bins (°) | Average number of violations per model | Max (°) |
|--------------------|--|---------|
| 1.0-10.0 (Small) | 4.3 | 9.6 |
| 10.0-20.0 (Medium) | 0.0 | 10.6 |
| >20.0 (Large) | None | None |

9 Distance violation analysis i

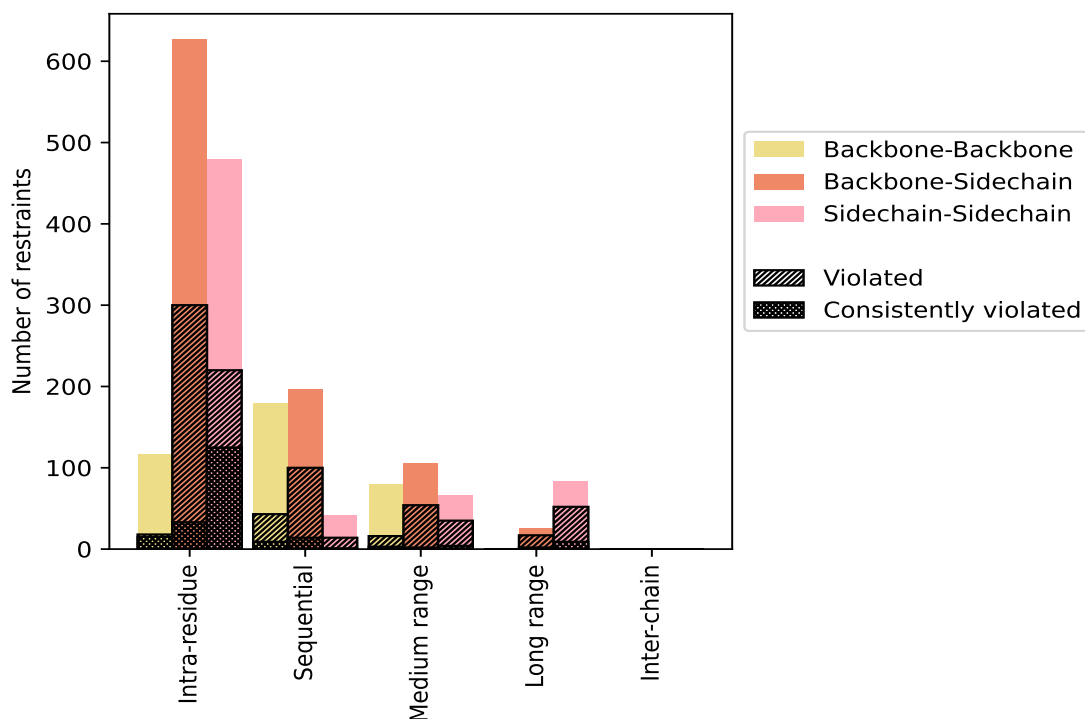
9.1 Summary of distance violations i

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

| Restrains type | Count | % ¹ | Violated ³ | | | Consistently Violated ⁴ | | |
|---|-------------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
| | | | Count | % ² | % ¹ | Count | % ² | % ¹ |
| Intra-residue ($i-j =0$) | 1222 | 61.2 | 538 | 44.0 | 27.0 | 173 | 14.2 | 8.7 |
| Backbone-Backbone | 116 | 5.8 | 18 | 15.5 | 0.9 | 15 | 12.9 | 0.8 |
| Backbone-Sidechain | 627 | 31.4 | 300 | 47.8 | 15.0 | 33 | 5.3 | 1.7 |
| Sidechain-Sidechain | 479 | 24.0 | 220 | 45.9 | 11.0 | 125 | 26.1 | 6.3 |
| Sequential ($i-j =1$) | 416 | 20.8 | 157 | 37.7 | 7.9 | 24 | 5.8 | 1.2 |
| Backbone-Backbone | 179 | 9.0 | 43 | 24.0 | 2.2 | 9 | 5.0 | 0.5 |
| Backbone-Sidechain | 196 | 9.8 | 100 | 51.0 | 5.0 | 14 | 7.1 | 0.7 |
| Sidechain-Sidechain | 41 | 2.1 | 14 | 34.1 | 0.7 | 1 | 2.4 | 0.1 |
| Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$) | 250 | 12.5 | 105 | 42.0 | 5.3 | 9 | 3.6 | 0.5 |
| Backbone-Backbone | 79 | 4.0 | 16 | 20.3 | 0.8 | 3 | 3.8 | 0.2 |
| Backbone-Sidechain | 105 | 5.3 | 54 | 51.4 | 2.7 | 2 | 1.9 | 0.1 |
| Sidechain-Sidechain | 66 | 3.3 | 35 | 53.0 | 1.8 | 4 | 6.1 | 0.2 |
| Long range ($i-j \geq 5$) | 106 | 5.3 | 69 | 65.1 | 3.5 | 11 | 10.4 | 0.6 |
| Backbone-Backbone | 0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 25 | 1.3 | 17 | 68.0 | 0.9 | 2 | 8.0 | 0.1 |
| Sidechain-Sidechain | 81 | 4.1 | 52 | 64.2 | 2.6 | 9 | 11.1 | 0.5 |
| 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 | 2 | 0.1 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Total | 1996 | 100.0 | 869 | 43.5 | 43.5 | 217 | 10.9 | 10.9 |
| Backbone-Backbone | 374 | 18.7 | 77 | 20.6 | 3.9 | 27 | 7.2 | 1.4 |
| Backbone-Sidechain | 953 | 47.7 | 471 | 49.4 | 23.6 | 51 | 5.4 | 2.6 |
| Sidechain-Sidechain | 669 | 33.5 | 321 | 48.0 | 16.1 | 139 | 20.8 | 7.0 |

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 | 310 | 85 | 33 | 22 | 0 | 450 | 0.31 | 1.75 | 0.2 | 0.25 |
| 2 | 336 | 82 | 24 | 19 | 0 | 461 | 0.32 | 1.86 | 0.22 | 0.26 |
| 3 | 329 | 84 | 31 | 24 | 0 | 468 | 0.33 | 2.37 | 0.25 | 0.26 |
| 4 | 330 | 90 | 27 | 32 | 0 | 479 | 0.36 | 2.46 | 0.3 | 0.27 |
| 5 | 338 | 82 | 30 | 38 | 0 | 488 | 0.37 | 2.45 | 0.29 | 0.28 |
| 6 | 323 | 98 | 26 | 29 | 0 | 476 | 0.31 | 1.86 | 0.21 | 0.25 |
| 7 | 311 | 79 | 37 | 23 | 0 | 450 | 0.35 | 2.25 | 0.25 | 0.28 |
| 8 | 320 | 95 | 27 | 26 | 0 | 468 | 0.32 | 1.82 | 0.22 | 0.25 |
| 9 | 315 | 78 | 34 | 25 | 0 | 452 | 0.32 | 1.81 | 0.22 | 0.25 |
| 10 | 318 | 83 | 27 | 25 | 0 | 453 | 0.31 | 1.84 | 0.21 | 0.25 |
| 11 | 312 | 80 | 34 | 22 | 0 | 448 | 0.31 | 1.66 | 0.2 | 0.25 |

Continued on next page...

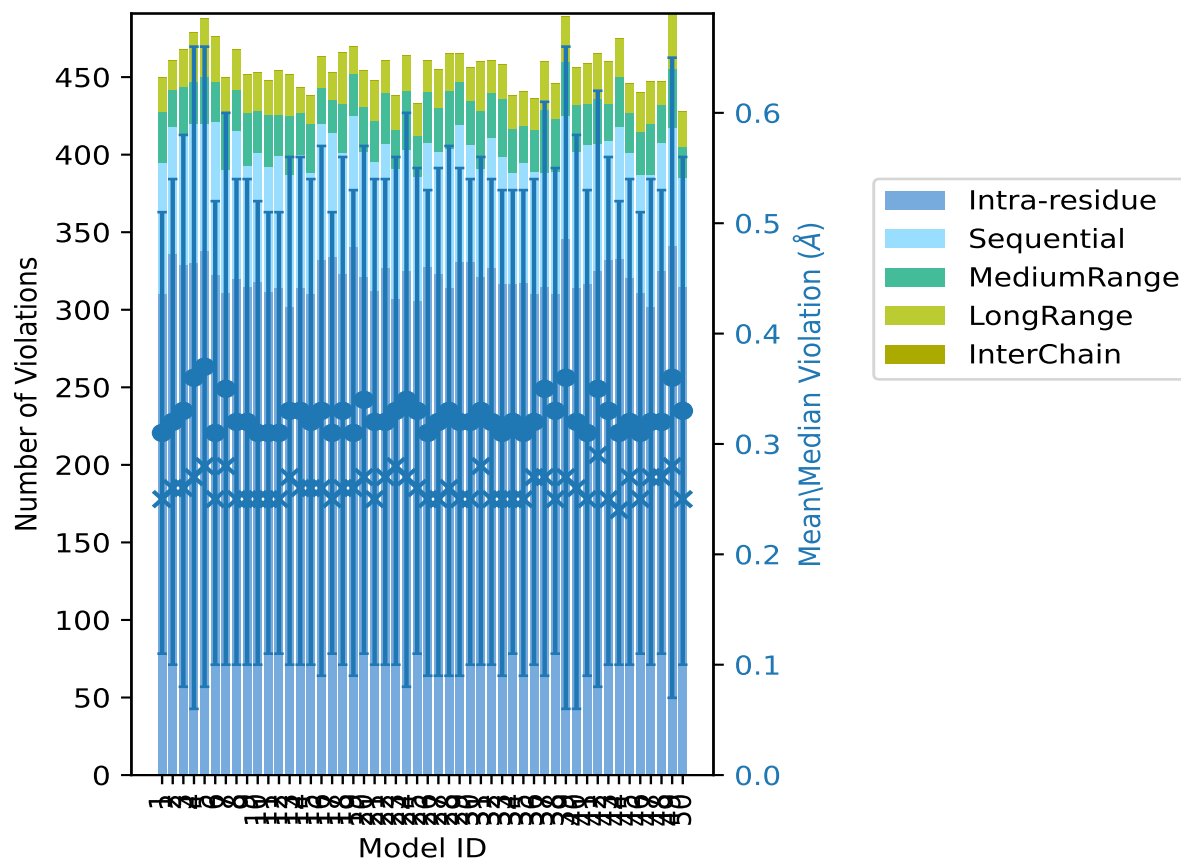
Continued from previous page...

| 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 | 314 | 85 | 27 | 28 | 0 | 454 | 0.31 | 1.89 | 0.2 | 0.25 |
| 13 | 302 | 85 | 38 | 27 | 0 | 452 | 0.33 | 2.17 | 0.23 | 0.27 |
| 14 | 314 | 86 | 27 | 16 | 0 | 443 | 0.33 | 1.84 | 0.23 | 0.26 |
| 15 | 310 | 78 | 32 | 18 | 0 | 438 | 0.32 | 1.99 | 0.22 | 0.26 |
| 16 | 332 | 88 | 23 | 20 | 0 | 463 | 0.33 | 1.88 | 0.24 | 0.26 |
| 17 | 334 | 80 | 21 | 18 | 0 | 453 | 0.31 | 1.76 | 0.2 | 0.25 |
| 18 | 323 | 78 | 32 | 33 | 0 | 466 | 0.33 | 2.12 | 0.23 | 0.26 |
| 19 | 341 | 84 | 27 | 18 | 0 | 470 | 0.31 | 1.79 | 0.22 | 0.26 |
| 20 | 321 | 81 | 29 | 23 | 0 | 454 | 0.34 | 1.86 | 0.23 | 0.27 |
| 21 | 312 | 83 | 27 | 26 | 0 | 448 | 0.32 | 1.79 | 0.22 | 0.25 |
| 22 | 327 | 80 | 33 | 21 | 0 | 461 | 0.32 | 1.62 | 0.22 | 0.27 |
| 23 | 307 | 84 | 25 | 22 | 0 | 438 | 0.33 | 2.34 | 0.23 | 0.28 |
| 24 | 325 | 78 | 38 | 23 | 0 | 464 | 0.34 | 2.51 | 0.26 | 0.27 |
| 25 | 306 | 80 | 26 | 21 | 0 | 433 | 0.33 | 1.83 | 0.22 | 0.26 |
| 26 | 328 | 80 | 33 | 20 | 0 | 461 | 0.31 | 1.8 | 0.22 | 0.25 |
| 27 | 323 | 79 | 28 | 25 | 0 | 455 | 0.32 | 1.94 | 0.23 | 0.25 |
| 28 | 314 | 90 | 37 | 24 | 0 | 465 | 0.33 | 2.36 | 0.24 | 0.26 |
| 29 | 331 | 88 | 28 | 18 | 0 | 465 | 0.32 | 1.98 | 0.23 | 0.25 |
| 30 | 331 | 75 | 29 | 21 | 0 | 456 | 0.32 | 1.85 | 0.22 | 0.25 |
| 31 | 321 | 70 | 37 | 32 | 0 | 460 | 0.33 | 2.12 | 0.23 | 0.28 |
| 32 | 327 | 84 | 29 | 21 | 0 | 461 | 0.32 | 2.03 | 0.22 | 0.25 |
| 33 | 317 | 82 | 37 | 22 | 0 | 458 | 0.31 | 1.79 | 0.22 | 0.25 |
| 34 | 317 | 71 | 29 | 21 | 0 | 438 | 0.32 | 1.8 | 0.21 | 0.25 |
| 35 | 317 | 78 | 24 | 22 | 0 | 441 | 0.31 | 1.94 | 0.22 | 0.25 |
| 36 | 310 | 79 | 27 | 20 | 0 | 436 | 0.32 | 1.84 | 0.22 | 0.27 |
| 37 | 315 | 73 | 41 | 31 | 0 | 460 | 0.35 | 2.28 | 0.26 | 0.27 |
| 38 | 310 | 79 | 34 | 23 | 0 | 446 | 0.33 | 1.79 | 0.22 | 0.25 |
| 39 | 346 | 79 | 35 | 29 | 0 | 489 | 0.36 | 2.54 | 0.3 | 0.27 |
| 40 | 314 | 88 | 30 | 24 | 0 | 456 | 0.32 | 3.15 | 0.26 | 0.26 |
| 41 | 317 | 89 | 27 | 26 | 0 | 459 | 0.31 | 1.88 | 0.22 | 0.25 |
| 42 | 325 | 82 | 29 | 29 | 0 | 465 | 0.35 | 2.28 | 0.27 | 0.29 |
| 43 | 332 | 77 | 24 | 27 | 0 | 460 | 0.33 | 2.0 | 0.23 | 0.25 |
| 44 | 333 | 85 | 32 | 25 | 0 | 475 | 0.31 | 1.67 | 0.21 | 0.24 |
| 45 | 321 | 80 | 26 | 19 | 0 | 446 | 0.32 | 1.89 | 0.22 | 0.27 |
| 46 | 311 | 76 | 28 | 25 | 0 | 440 | 0.31 | 1.6 | 0.2 | 0.25 |
| 47 | 302 | 85 | 33 | 27 | 0 | 447 | 0.32 | 1.92 | 0.22 | 0.27 |
| 48 | 325 | 83 | 24 | 15 | 0 | 447 | 0.32 | 1.9 | 0.21 | 0.27 |
| 49 | 341 | 76 | 38 | 36 | 0 | 491 | 0.36 | 2.36 | 0.29 | 0.28 |
| 50 | 315 | 70 | 20 | 23 | 0 | 428 | 0.33 | 1.9 | 0.23 | 0.25 |

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 [i](#)

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, 1125(IR:684, SQ:259, MR:145, LR:37, 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 | % |
| 34 | 12 | 24 | 7 | 0 | 77 | 1 | 2.0 |
| 24 | 4 | 15 | 3 | 0 | 46 | 2 | 4.0 |
| 6 | 4 | 4 | 5 | 0 | 19 | 3 | 6.0 |
| 15 | 10 | 15 | 6 | 0 | 46 | 4 | 8.0 |
| 27 | 3 | 1 | 7 | 0 | 38 | 5 | 10.0 |
| 13 | 6 | 5 | 2 | 0 | 26 | 6 | 12.0 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Number of violated restraints | | | | | | Fraction of the ensemble | |
|-------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|--------------------------|------|
| IR ¹ | SQ ² | MR ³ | LR ⁴ | IC ⁵ | Total | Count ⁶ | % |
| 0 | 4 | 3 | 0 | 0 | 7 | 7 | 14.0 |
| 9 | 0 | 0 | 0 | 0 | 9 | 8 | 16.0 |
| 3 | 3 | 1 | 4 | 0 | 11 | 9 | 18.0 |
| 10 | 3 | 1 | 0 | 0 | 14 | 10 | 20.0 |
| 10 | 4 | 3 | 3 | 0 | 20 | 11 | 22.0 |
| 5 | 3 | 0 | 0 | 0 | 8 | 12 | 24.0 |
| 9 | 3 | 0 | 6 | 0 | 18 | 13 | 26.0 |
| 3 | 0 | 3 | 3 | 0 | 9 | 14 | 28.0 |
| 7 | 3 | 0 | 0 | 0 | 10 | 15 | 30.0 |
| 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 4 | 16 | 32.0 |
| 15 | 4 | 0 | 1 | 0 | 20 | 17 | 34.0 |
| 4 | 2 | 2 | 0 | 0 | 8 | 18 | 36.0 |
| 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 6 | 19 | 38.0 |
| 6 | 0 | 1 | 4 | 0 | 11 | 20 | 40.0 |
| 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 2 | 21 | 42.0 |
| 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 3 | 22 | 44.0 |
| 4 | 3 | 3 | 0 | 0 | 10 | 23 | 46.0 |
| 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 6 | 24 | 48.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 25 | 50.0 |
| 4 | 7 | 0 | 0 | 0 | 11 | 26 | 52.0 |
| 7 | 3 | 0 | 0 | 0 | 10 | 27 | 54.0 |
| 10 | 0 | 3 | 0 | 0 | 13 | 28 | 56.0 |
| 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 4 | 29 | 58.0 |
| 7 | 6 | 0 | 0 | 0 | 13 | 30 | 60.0 |
| 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 3 | 31 | 62.0 |
| 12 | 6 | 0 | 0 | 0 | 18 | 32 | 64.0 |
| 10 | 3 | 0 | 0 | 0 | 13 | 33 | 66.0 |
| 0 | 3 | 0 | 4 | 0 | 7 | 34 | 68.0 |
| 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 35 | 70.0 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 36 | 72.0 |
| 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 37 | 74.0 |
| 0 | 3 | 0 | 0 | 0 | 3 | 38 | 76.0 |
| 13 | 0 | 0 | 1 | 0 | 14 | 39 | 78.0 |
| 4 | 2 | 0 | 0 | 0 | 6 | 40 | 80.0 |
| 0 | 3 | 0 | 0 | 0 | 3 | 41 | 82.0 |
| 7 | 3 | 0 | 0 | 0 | 10 | 42 | 84.0 |
| 5 | 3 | 1 | 0 | 0 | 9 | 43 | 86.0 |
| 6 | 6 | 0 | 0 | 0 | 12 | 44 | 88.0 |
| 3 | 4 | 1 | 1 | 0 | 9 | 45 | 90.0 |
| 8 | 0 | 0 | 0 | 0 | 8 | 46 | 92.0 |
| 7 | 1 | 2 | 0 | 0 | 10 | 47 | 94.0 |

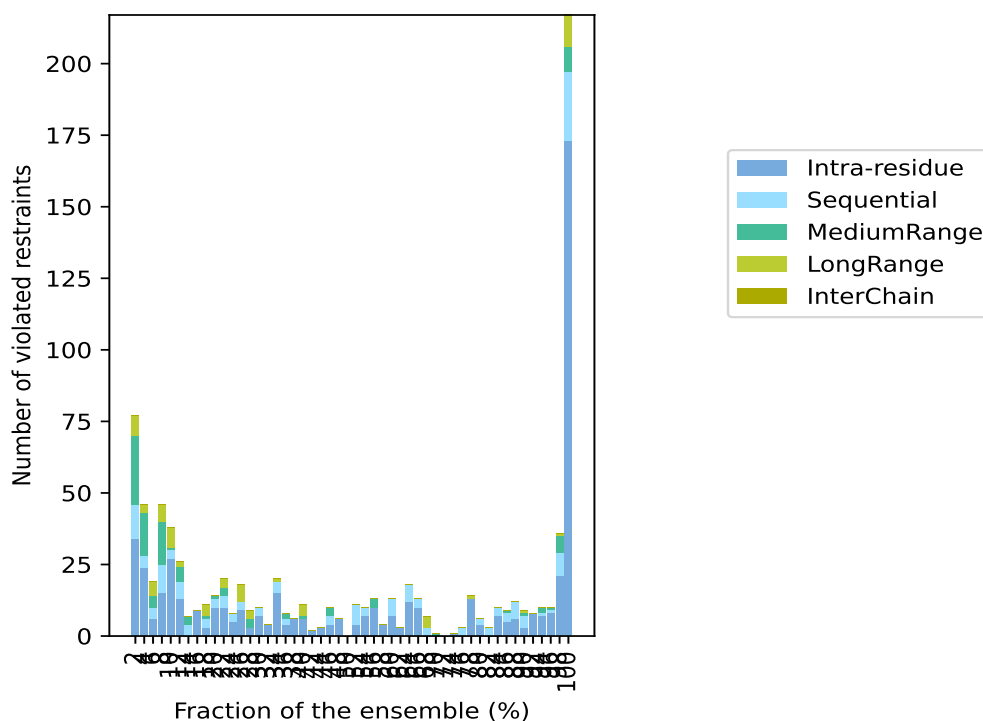
Continued on next page...

Continued from previous page...

| Number of violated restraints | | | | | | Fraction of the ensemble | |
|-------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|--------------------------|-------|
| IR ¹ | SQ ² | MR ³ | LR ⁴ | IC ⁵ | Total | Count ⁶ | % |
| 8 | 1 | 1 | 0 | 0 | 10 | 48 | 96.0 |
| 21 | 8 | 6 | 1 | 0 | 36 | 49 | 98.0 |
| 173 | 24 | 9 | 11 | 0 | 217 | 50 | 100.0 |

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

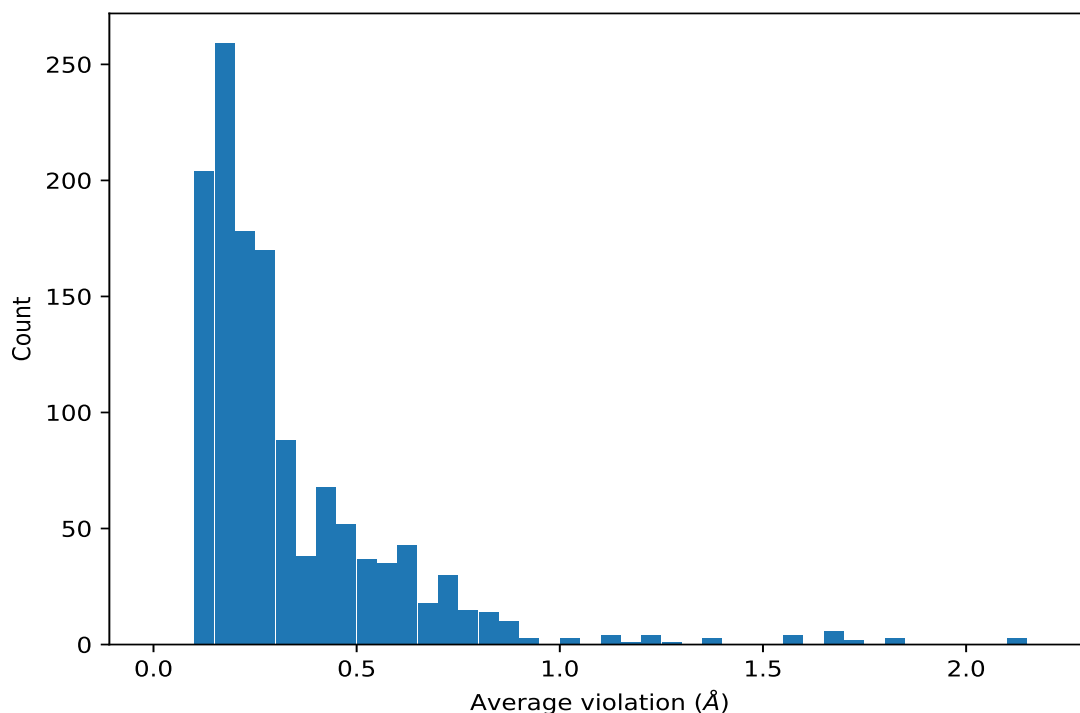
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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) |
|----------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 50 | 1.73 | 0.15 | 1.76 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 50 | 1.73 | 0.15 | 1.76 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 1.57 | 0.3 | 1.64 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 1.02 | 0.19 | 1.08 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 1.02 | 0.19 | 1.08 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 1.02 | 0.19 | 1.08 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 50 | 0.79 | 0.01 | 0.79 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.75 | 0.83 | 0.34 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 50 | 0.72 | 0.05 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 50 | 0.72 | 0.05 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 50 | 0.72 | 0.05 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 50 | 0.72 | 0.05 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 50 | 0.72 | 0.05 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 50 | 0.72 | 0.05 | 0.77 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 50 | 0.72 | 0.02 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 50 | 0.72 | 0.02 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------|----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 50 | 0.72 | 0.02 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 50 | 0.72 | 0.02 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 50 | 0.72 | 0.02 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 50 | 0.72 | 0.02 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 50 | 0.72 | 0.02 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 50 | 0.72 | 0.02 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 50 | 0.72 | 0.02 | 0.72 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 50 | 0.62 | 0.14 | 0.66 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 50 | 0.62 | 0.14 | 0.66 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 50 | 0.62 | 0.14 | 0.66 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 50 | 0.62 | 0.14 | 0.66 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 50 | 0.62 | 0.14 | 0.66 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 50 | 0.62 | 0.14 | 0.66 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 50 | 0.62 | 0.07 | 0.63 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 50 | 0.62 | 0.07 | 0.63 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 50 | 0.62 | 0.07 | 0.63 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 50 | 0.62 | 0.02 | 0.62 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 50 | 0.62 | 0.02 | 0.62 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 50 | 0.62 | 0.02 | 0.62 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 50 | 0.61 | 0.08 | 0.63 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 50 | 0.61 | 0.08 | 0.63 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 50 | 0.61 | 0.08 | 0.63 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 50 | 0.56 | 0.05 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 50 | 0.56 | 0.05 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 50 | 0.56 | 0.05 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 50 | 0.56 | 0.05 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 50 | 0.56 | 0.05 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 50 | 0.56 | 0.05 | 0.57 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.53 | 0.12 | 0.52 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.53 | 0.12 | 0.52 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.53 | 0.12 | 0.52 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.53 | 0.12 | 0.52 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.53 | 0.12 | 0.52 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.53 | 0.12 | 0.52 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.53 | 0.12 | 0.52 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.53 | 0.12 | 0.52 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.53 | 0.12 | 0.52 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 50 | 0.52 | 0.05 | 0.5 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 50 | 0.52 | 0.05 | 0.5 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 50 | 0.52 | 0.05 | 0.5 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 50 | 0.5 | 0.06 | 0.49 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 50 | 0.5 | 0.06 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 50 | 0.5 | 0.01 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 50 | 0.5 | 0.01 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 50 | 0.5 | 0.01 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 50 | 0.5 | 0.01 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 50 | 0.5 | 0.01 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 50 | 0.5 | 0.01 | 0.5 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 50 | 0.49 | 0.04 | 0.49 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 50 | 0.49 | 0.04 | 0.49 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 50 | 0.49 | 0.04 | 0.49 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 50 | 0.48 | 0.05 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 50 | 0.48 | 0.05 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 50 | 0.48 | 0.05 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 50 | 0.48 | 0.05 | 0.5 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 50 | 0.48 | 0.23 | 0.67 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 50 | 0.48 | 0.23 | 0.67 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 50 | 0.47 | 0.18 | 0.47 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 50 | 0.47 | 0.18 | 0.47 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 50 | 0.47 | 0.18 | 0.47 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.46 | 0.02 | 0.46 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.46 | 0.02 | 0.46 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.46 | 0.02 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 50 | 0.46 | 0.0 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 50 | 0.46 | 0.0 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 50 | 0.46 | 0.0 | 0.46 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 50 | 0.46 | 0.19 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 50 | 0.46 | 0.19 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 50 | 0.46 | 0.19 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 50 | 0.46 | 0.19 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 50 | 0.46 | 0.19 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 50 | 0.46 | 0.19 | 0.39 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 50 | 0.45 | 0.01 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 50 | 0.45 | 0.01 | 0.44 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 50 | 0.45 | 0.0 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 50 | 0.45 | 0.0 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 50 | 0.45 | 0.0 | 0.45 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 50 | 0.45 | 0.06 | 0.43 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 50 | 0.45 | 0.06 | 0.43 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 50 | 0.45 | 0.06 | 0.43 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 50 | 0.45 | 0.06 | 0.43 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 50 | 0.45 | 0.06 | 0.43 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 50 | 0.45 | 0.06 | 0.43 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 50 | 0.45 | 0.06 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 50 | 0.45 | 0.06 | 0.43 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 50 | 0.45 | 0.06 | 0.43 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 50 | 0.45 | 0.02 | 0.45 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 50 | 0.44 | 0.05 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 50 | 0.44 | 0.05 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 50 | 0.44 | 0.05 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 50 | 0.44 | 0.05 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 50 | 0.44 | 0.05 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 50 | 0.44 | 0.05 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 50 | 0.44 | 0.02 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 50 | 0.44 | 0.02 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 50 | 0.44 | 0.02 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 50 | 0.43 | 0.01 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 50 | 0.43 | 0.01 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 50 | 0.43 | 0.01 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 50 | 0.41 | 0.02 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 50 | 0.41 | 0.02 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 50 | 0.41 | 0.02 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 50 | 0.41 | 0.02 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 50 | 0.41 | 0.02 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 50 | 0.41 | 0.02 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 50 | 0.41 | 0.02 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 50 | 0.41 | 0.02 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 50 | 0.41 | 0.02 | 0.41 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 50 | 0.41 | 0.04 | 0.42 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 50 | 0.41 | 0.04 | 0.42 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 50 | 0.41 | 0.04 | 0.42 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 50 | 0.41 | 0.0 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 50 | 0.41 | 0.0 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 50 | 0.41 | 0.0 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 50 | 0.41 | 0.0 | 0.41 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 50 | 0.4 | 0.07 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 50 | 0.4 | 0.07 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 50 | 0.4 | 0.07 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 50 | 0.4 | 0.07 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 50 | 0.4 | 0.07 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 50 | 0.4 | 0.07 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 50 | 0.4 | 0.03 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 50 | 0.4 | 0.03 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 50 | 0.4 | 0.03 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 50 | 0.4 | 0.03 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 50 | 0.4 | 0.03 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 50 | 0.4 | 0.03 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 50 | 0.4 | 0.03 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 50 | 0.4 | 0.03 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 50 | 0.4 | 0.03 | 0.41 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 50 | 0.38 | 0.03 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 50 | 0.38 | 0.03 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 50 | 0.38 | 0.03 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 50 | 0.38 | 0.03 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 50 | 0.38 | 0.03 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 50 | 0.38 | 0.03 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 50 | 0.38 | 0.03 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 50 | 0.38 | 0.03 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 50 | 0.38 | 0.03 | 0.37 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 50 | 0.38 | 0.03 | 0.38 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 50 | 0.36 | 0.0 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 50 | 0.36 | 0.0 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 50 | 0.36 | 0.0 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 50 | 0.36 | 0.0 | 0.36 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 50 | 0.34 | 0.03 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 50 | 0.34 | 0.03 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 50 | 0.34 | 0.03 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 50 | 0.34 | 0.03 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 50 | 0.34 | 0.03 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 50 | 0.34 | 0.03 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 50 | 0.34 | 0.03 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 50 | 0.34 | 0.03 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 50 | 0.34 | 0.03 | 0.32 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 50 | 0.33 | 0.05 | 0.35 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 50 | 0.33 | 0.05 | 0.35 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 50 | 0.33 | 0.05 | 0.35 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 50 | 0.33 | 0.0 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 50 | 0.33 | 0.0 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 50 | 0.33 | 0.0 | 0.33 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 50 | 0.33 | 0.01 | 0.33 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 50 | 0.33 | 0.01 | 0.33 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 50 | 0.33 | 0.01 | 0.33 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 50 | 0.32 | 0.0 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 50 | 0.32 | 0.0 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 50 | 0.32 | 0.0 | 0.32 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 50 | 0.31 | 0.01 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 50 | 0.31 | 0.01 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 50 | 0.31 | 0.01 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------|----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 50 | 0.31 | 0.0 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 50 | 0.31 | 0.0 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 50 | 0.31 | 0.0 | 0.31 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 50 | 0.31 | 0.05 | 0.29 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 50 | 0.31 | 0.05 | 0.29 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 50 | 0.31 | 0.05 | 0.29 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 50 | 0.3 | 0.01 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 50 | 0.3 | 0.01 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 50 | 0.3 | 0.01 | 0.3 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 50 | 0.3 | 0.08 | 0.29 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 50 | 0.3 | 0.03 | 0.3 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 50 | 0.3 | 0.03 | 0.3 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 50 | 0.3 | 0.03 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 50 | 0.29 | 0.0 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 50 | 0.29 | 0.0 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 50 | 0.29 | 0.0 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 50 | 0.29 | 0.0 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 50 | 0.29 | 0.0 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 50 | 0.29 | 0.0 | 0.29 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 50 | 0.29 | 0.11 | 0.24 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 50 | 0.29 | 0.11 | 0.24 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 50 | 0.29 | 0.0 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 50 | 0.29 | 0.0 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 50 | 0.29 | 0.0 | 0.29 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 50 | 0.28 | 0.0 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 50 | 0.28 | 0.0 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 50 | 0.28 | 0.0 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 50 | 0.28 | 0.0 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 50 | 0.28 | 0.0 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 50 | 0.28 | 0.0 | 0.28 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 50 | 0.27 | 0.0 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 50 | 0.27 | 0.0 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 50 | 0.27 | 0.0 | 0.27 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 50 | 0.27 | 0.01 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 50 | 0.27 | 0.01 | 0.26 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 50 | 0.26 | 0.04 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 50 | 0.26 | 0.04 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 50 | 0.26 | 0.04 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 50 | 0.26 | 0.04 | 0.24 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 50 | 0.26 | 0.01 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 50 | 0.25 | 0.0 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 50 | 0.25 | 0.0 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 50 | 0.25 | 0.0 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 50 | 0.25 | 0.0 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 50 | 0.25 | 0.0 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 50 | 0.25 | 0.0 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 50 | 0.25 | 0.0 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 50 | 0.25 | 0.0 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 50 | 0.25 | 0.0 | 0.25 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 50 | 0.24 | 0.06 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 50 | 0.24 | 0.06 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 50 | 0.24 | 0.06 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 50 | 0.24 | 0.06 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 50 | 0.24 | 0.06 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 50 | 0.24 | 0.06 | 0.23 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 50 | 0.24 | 0.01 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 50 | 0.24 | 0.01 | 0.24 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 50 | 0.24 | 0.04 | 0.25 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 50 | 0.24 | 0.04 | 0.25 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 50 | 0.24 | 0.04 | 0.25 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 50 | 0.24 | 0.0 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 50 | 0.24 | 0.0 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 50 | 0.24 | 0.0 | 0.24 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 50 | 0.24 | 0.04 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 50 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 50 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 50 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 50 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 50 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 50 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 50 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 50 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 50 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 50 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 50 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 50 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 50 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 50 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 50 | 0.23 | 0.0 | 0.23 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 50 | 0.23 | 0.04 | 0.23 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 50 | 0.23 | 0.04 | 0.23 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 50 | 0.23 | 0.04 | 0.23 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 50 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 50 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 50 | 0.22 | 0.01 | 0.22 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 50 | 0.21 | 0.0 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 50 | 0.21 | 0.0 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 50 | 0.21 | 0.0 | 0.21 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 50 | 0.21 | 0.05 | 0.21 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 50 | 0.21 | 0.05 | 0.21 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 50 | 0.21 | 0.05 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 50 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 50 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 50 | 0.2 | 0.03 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 50 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 50 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 50 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 50 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 50 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 50 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 50 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 50 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 50 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 50 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 50 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 50 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 50 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 50 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 50 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 50 | 0.2 | 0.01 | 0.2 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 50 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 50 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 50 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 50 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 50 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 50 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 50 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 50 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 50 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 50 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 50 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 50 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 50 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 50 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 50 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 50 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 50 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 50 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 50 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 50 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 50 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 50 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 50 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 50 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 50 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 50 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 50 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 50 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 50 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 50 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 50 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 50 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 50 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 50 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 50 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 50 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 50 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 50 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 50 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 50 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 50 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 50 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 50 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 49 | 1.21 | 0.18 | 1.25 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 49 | 1.21 | 0.18 | 1.25 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 49 | 1.21 | 0.18 | 1.25 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 49 | 1.17 | 0.74 | 1.71 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 49 | 1.1 | 0.13 | 1.05 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 0.85 | 0.23 | 0.85 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 0.85 | 0.23 | 0.85 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 0.85 | 0.23 | 0.85 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 49 | 0.79 | 0.25 | 0.84 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 49 | 0.79 | 0.25 | 0.84 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 49 | 0.79 | 0.25 | 0.84 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 49 | 0.62 | 0.14 | 0.65 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 49 | 0.62 | 0.14 | 0.65 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 49 | 0.62 | 0.14 | 0.65 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 49 | 0.55 | 0.08 | 0.58 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 49 | 0.55 | 0.08 | 0.58 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 49 | 0.55 | 0.08 | 0.58 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 49 | 0.31 | 0.02 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 49 | 0.31 | 0.02 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 49 | 0.31 | 0.02 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 49 | 0.3 | 0.08 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 49 | 0.3 | 0.08 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 49 | 0.3 | 0.08 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 49 | 0.3 | 0.08 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 49 | 0.3 | 0.08 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 49 | 0.3 | 0.08 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 49 | 0.3 | 0.08 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 49 | 0.3 | 0.08 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 49 | 0.3 | 0.08 | 0.29 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 49 | 0.28 | 0.06 | 0.29 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 49 | 0.28 | 0.06 | 0.29 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 49 | 0.28 | 0.06 | 0.29 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 49 | 0.28 | 0.07 | 0.27 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 49 | 0.28 | 0.07 | 0.27 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 49 | 0.28 | 0.07 | 0.27 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 49 | 0.26 | 0.07 | 0.25 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 49 | 0.26 | 0.07 | 0.25 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 49 | 0.23 | 0.12 | 0.19 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 49 | 0.23 | 0.12 | 0.19 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 49 | 0.23 | 0.12 | 0.19 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 49 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 49 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 49 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 49 | 0.18 | 0.05 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 49 | 0.18 | 0.05 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 49 | 0.18 | 0.05 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 49 | 0.18 | 0.05 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 49 | 0.18 | 0.05 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 49 | 0.18 | 0.05 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 49 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 49 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 49 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 49 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 49 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 49 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 49 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 49 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 49 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 49 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 48 | 1.21 | 0.14 | 1.21 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 48 | 0.49 | 0.01 | 0.49 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 48 | 0.42 | 0.02 | 0.42 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 48 | 0.42 | 0.02 | 0.42 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 48 | 0.42 | 0.02 | 0.42 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 48 | 0.33 | 0.1 | 0.36 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 48 | 0.33 | 0.1 | 0.36 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 48 | 0.33 | 0.1 | 0.36 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.26 | 0.05 | 0.26 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.26 | 0.05 | 0.26 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.26 | 0.05 | 0.26 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 48 | 0.21 | 0.08 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 48 | 0.21 | 0.08 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 48 | 0.21 | 0.08 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 48 | 0.21 | 0.08 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 48 | 0.21 | 0.08 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 48 | 0.21 | 0.08 | 0.16 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 47 | 0.56 | 0.21 | 0.56 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 47 | 0.56 | 0.21 | 0.56 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 47 | 0.55 | 0.34 | 0.46 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 47 | 0.55 | 0.34 | 0.46 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 47 | 0.32 | 0.04 | 0.34 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 47 | 0.32 | 0.04 | 0.34 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 47 | 0.31 | 0.13 | 0.33 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 47 | 0.3 | 0.05 | 0.3 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 47 | 0.3 | 0.05 | 0.3 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 47 | 0.3 | 0.05 | 0.3 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 47 | 0.23 | 0.01 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 47 | 0.23 | 0.01 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 47 | 0.23 | 0.01 | 0.23 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 46 | 0.4 | 0.03 | 0.41 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 46 | 0.4 | 0.03 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 46 | 0.4 | 0.03 | 0.41 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 46 | 0.3 | 0.02 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 46 | 0.3 | 0.02 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 46 | 0.3 | 0.02 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 46 | 0.3 | 0.02 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 46 | 0.3 | 0.02 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 46 | 0.3 | 0.02 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 46 | 0.3 | 0.02 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 46 | 0.3 | 0.02 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 46 | 0.3 | 0.02 | 0.31 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 46 | 0.24 | 0.05 | 0.25 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 46 | 0.24 | 0.05 | 0.25 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 46 | 0.24 | 0.05 | 0.25 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 46 | 0.21 | 0.04 | 0.21 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 45 | 0.48 | 0.14 | 0.51 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 45 | 0.35 | 0.1 | 0.36 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 45 | 0.35 | 0.1 | 0.36 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 45 | 0.35 | 0.1 | 0.36 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 45 | 0.3 | 0.03 | 0.3 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 45 | 0.24 | 0.07 | 0.24 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 45 | 0.24 | 0.07 | 0.24 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 45 | 0.24 | 0.07 | 0.24 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 45 | 0.24 | 0.07 | 0.24 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 45 | 0.24 | 0.07 | 0.24 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 45 | 0.24 | 0.07 | 0.24 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 45 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 45 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 45 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 44 | 0.57 | 0.2 | 0.5 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 44 | 0.57 | 0.2 | 0.5 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 44 | 0.57 | 0.2 | 0.5 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 44 | 0.26 | 0.07 | 0.26 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 44 | 0.26 | 0.07 | 0.26 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 44 | 0.26 | 0.07 | 0.26 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 44 | 0.24 | 0.03 | 0.24 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 44 | 0.24 | 0.03 | 0.24 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 44 | 0.24 | 0.03 | 0.24 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 44 | 0.18 | 0.02 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 44 | 0.18 | 0.02 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 44 | 0.18 | 0.02 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 44 | 0.18 | 0.02 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 44 | 0.18 | 0.02 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 44 | 0.18 | 0.02 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 44 | 0.18 | 0.02 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 44 | 0.18 | 0.02 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 44 | 0.18 | 0.02 | 0.19 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 43 | 0.32 | 0.13 | 0.34 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 43 | 0.32 | 0.13 | 0.34 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 43 | 0.32 | 0.13 | 0.34 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 43 | 0.32 | 0.13 | 0.34 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 43 | 0.32 | 0.13 | 0.34 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 43 | 0.32 | 0.13 | 0.34 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 43 | 0.29 | 0.17 | 0.21 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 43 | 0.29 | 0.17 | 0.21 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 43 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 43 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 43 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 43 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 43 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 43 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.4 | 0.1 | 0.4 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.4 | 0.1 | 0.4 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.4 | 0.1 | 0.4 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 42 | 0.27 | 0.03 | 0.27 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 42 | 0.27 | 0.03 | 0.27 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 42 | 0.27 | 0.03 | 0.27 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 42 | 0.19 | 0.03 | 0.18 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 42 | 0.19 | 0.03 | 0.18 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 42 | 0.19 | 0.03 | 0.18 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 42 | 0.12 | 0.01 | 0.13 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 41 | 0.2 | 0.07 | 0.18 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 41 | 0.2 | 0.07 | 0.18 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 41 | 0.2 | 0.07 | 0.18 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 40 | 0.3 | 0.09 | 0.3 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 40 | 0.3 | 0.09 | 0.3 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 40 | 0.3 | 0.09 | 0.3 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 40 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 40 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 40 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 40 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 40 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 40 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 40 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.88 | 0.09 | 0.88 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 39 | 0.77 | 0.15 | 0.76 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 39 | 0.77 | 0.15 | 0.76 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 39 | 0.77 | 0.15 | 0.76 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 39 | 0.71 | 0.26 | 0.83 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 39 | 0.71 | 0.26 | 0.83 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 39 | 0.71 | 0.26 | 0.83 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 39 | 0.71 | 0.26 | 0.83 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 39 | 0.71 | 0.26 | 0.83 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 39 | 0.71 | 0.26 | 0.83 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 39 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 39 | 0.18 | 0.05 | 0.17 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 39 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 39 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 39 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 39 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 39 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 39 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 38 | 0.19 | 0.05 | 0.19 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 38 | 0.19 | 0.05 | 0.19 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 38 | 0.19 | 0.05 | 0.19 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 37 | 0.3 | 0.07 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 37 | 0.3 | 0.07 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 37 | 0.3 | 0.07 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 37 | 0.3 | 0.07 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 37 | 0.3 | 0.07 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 37 | 0.3 | 0.07 | 0.3 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 35 | 0.2 | 0.05 | 0.21 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 34 | 0.57 | 0.04 | 0.57 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.28 | 0.11 | 0.27 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.28 | 0.11 | 0.27 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.28 | 0.11 | 0.27 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.28 | 0.11 | 0.27 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.28 | 0.11 | 0.27 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.28 | 0.11 | 0.27 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.28 | 0.11 | 0.27 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.28 | 0.11 | 0.27 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.28 | 0.11 | 0.27 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 34 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 34 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 34 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 33 | 0.54 | 0.27 | 0.43 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 33 | 0.54 | 0.27 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 33 | 0.54 | 0.27 | 0.43 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 33 | 0.54 | 0.27 | 0.43 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 33 | 0.54 | 0.27 | 0.43 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 33 | 0.54 | 0.27 | 0.43 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 33 | 0.38 | 0.06 | 0.38 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 33 | 0.38 | 0.06 | 0.38 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 33 | 0.38 | 0.06 | 0.38 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 33 | 0.38 | 0.06 | 0.38 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 33 | 0.38 | 0.06 | 0.38 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 33 | 0.38 | 0.06 | 0.38 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 33 | 0.29 | 0.17 | 0.23 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 33 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 33 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 33 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 33 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 33 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 33 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 33 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 33 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 33 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 32 | 0.34 | 0.06 | 0.32 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 32 | 0.34 | 0.06 | 0.32 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 32 | 0.34 | 0.06 | 0.32 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 32 | 0.33 | 0.08 | 0.34 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 32 | 0.33 | 0.08 | 0.34 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 32 | 0.33 | 0.08 | 0.34 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 32 | 0.27 | 0.07 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 32 | 0.27 | 0.07 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 32 | 0.27 | 0.07 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 32 | 0.27 | 0.07 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 32 | 0.27 | 0.07 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 32 | 0.27 | 0.07 | 0.3 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 32 | 0.19 | 0.05 | 0.19 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 32 | 0.19 | 0.05 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 32 | 0.19 | 0.05 | 0.19 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 32 | 0.19 | 0.05 | 0.18 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 32 | 0.19 | 0.05 | 0.18 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 32 | 0.19 | 0.05 | 0.18 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 32 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 32 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 32 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 31 | 0.81 | 0.01 | 0.81 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------|----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 31 | 0.29 | 0.05 | 0.28 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 31 | 0.27 | 0.1 | 0.3 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 30 | 0.43 | 0.06 | 0.44 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 30 | 0.43 | 0.06 | 0.44 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 30 | 0.43 | 0.06 | 0.44 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 30 | 0.24 | 0.07 | 0.22 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 30 | 0.24 | 0.07 | 0.22 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 30 | 0.22 | 0.1 | 0.2 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 30 | 0.22 | 0.1 | 0.2 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 30 | 0.22 | 0.1 | 0.2 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 30 | 0.19 | 0.09 | 0.16 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 30 | 0.19 | 0.09 | 0.16 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 30 | 0.19 | 0.09 | 0.16 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 30 | 0.18 | 0.06 | 0.16 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 30 | 0.18 | 0.06 | 0.16 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 30 | 0.18 | 0.06 | 0.16 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 30 | 0.18 | 0.06 | 0.16 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 30 | 0.18 | 0.06 | 0.16 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 30 | 0.18 | 0.06 | 0.16 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 29 | 0.69 | 0.01 | 0.69 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 29 | 0.35 | 0.07 | 0.34 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 29 | 0.35 | 0.07 | 0.34 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 29 | 0.35 | 0.07 | 0.34 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.52 | 0.09 | 0.52 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.52 | 0.09 | 0.52 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.52 | 0.09 | 0.52 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 28 | 0.32 | 0.04 | 0.33 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 28 | 0.27 | 0.04 | 0.26 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 28 | 0.27 | 0.04 | 0.26 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 28 | 0.27 | 0.04 | 0.26 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 28 | 0.19 | 0.06 | 0.17 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 28 | 0.19 | 0.06 | 0.17 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 28 | 0.19 | 0.06 | 0.17 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 27 | 0.45 | 0.03 | 0.44 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 27 | 0.21 | 0.07 | 0.18 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 27 | 0.21 | 0.07 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 27 | 0.21 | 0.07 | 0.18 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 27 | 0.21 | 0.07 | 0.18 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 27 | 0.21 | 0.07 | 0.18 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 27 | 0.21 | 0.07 | 0.18 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 27 | 0.17 | 0.05 | 0.15 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 27 | 0.17 | 0.05 | 0.15 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 27 | 0.17 | 0.05 | 0.15 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 26 | 0.52 | 0.32 | 0.52 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 26 | 0.31 | 0.17 | 0.26 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.3 | 0.15 | 0.25 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.3 | 0.15 | 0.25 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.3 | 0.15 | 0.25 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.3 | 0.15 | 0.25 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.3 | 0.15 | 0.25 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.3 | 0.15 | 0.25 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.3 | 0.15 | 0.25 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.3 | 0.15 | 0.25 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.3 | 0.15 | 0.25 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 26 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 26 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 26 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 26 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 26 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 26 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 24 | 0.18 | 0.05 | 0.16 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 24 | 0.18 | 0.05 | 0.16 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 24 | 0.18 | 0.05 | 0.16 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 24 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 24 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 24 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 24 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 24 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 24 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 24 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 24 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 24 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 23 | 0.41 | 0.23 | 0.26 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 23 | 0.41 | 0.23 | 0.26 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 23 | 0.22 | 0.07 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|---------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 23 | 0.22 | 0.07 | 0.22 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 23 | 0.22 | 0.07 | 0.22 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 23 | 0.22 | 0.07 | 0.22 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 23 | 0.22 | 0.07 | 0.22 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 23 | 0.22 | 0.07 | 0.22 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 23 | 0.22 | 0.07 | 0.22 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 23 | 0.22 | 0.07 | 0.22 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 23 | 0.22 | 0.07 | 0.22 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 23 | 0.21 | 0.06 | 0.24 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 23 | 0.21 | 0.06 | 0.24 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 23 | 0.21 | 0.06 | 0.24 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 23 | 0.21 | 0.06 | 0.24 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 23 | 0.21 | 0.06 | 0.24 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 23 | 0.21 | 0.06 | 0.24 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 23 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 23 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 23 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 22 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 22 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 22 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 22 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 22 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 22 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 22 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 22 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 22 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 21 | 0.39 | 0.02 | 0.39 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 21 | 0.39 | 0.02 | 0.39 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 21 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 21 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.35 | 0.04 | 0.34 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.35 | 0.04 | 0.34 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.35 | 0.04 | 0.34 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 20 | 0.35 | 0.3 | 0.21 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 20 | 0.35 | 0.3 | 0.21 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 20 | 0.35 | 0.3 | 0.21 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 20 | 0.35 | 0.3 | 0.21 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 20 | 0.35 | 0.3 | 0.21 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 20 | 0.35 | 0.3 | 0.21 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 20 | 0.35 | 0.3 | 0.21 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 20 | 0.35 | 0.3 | 0.21 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 20 | 0.35 | 0.3 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 20 | 0.25 | 0.08 | 0.24 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 20 | 0.25 | 0.08 | 0.24 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 20 | 0.25 | 0.08 | 0.24 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 20 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 20 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 20 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 20 | 0.17 | 0.05 | 0.18 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 19 | 0.33 | 0.2 | 0.21 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 19 | 0.33 | 0.2 | 0.21 |
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 19 | 0.33 | 0.2 | 0.21 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 19 | 0.25 | 0.06 | 0.23 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 19 | 0.25 | 0.06 | 0.23 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 19 | 0.25 | 0.06 | 0.23 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:14:ASN:HB3 | 18 | 0.84 | 0.71 | 0.68 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:14:ASN:HB3 | 18 | 0.84 | 0.71 | 0.68 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:14:ASN:HB3 | 18 | 0.84 | 0.71 | 0.68 |
| (1,262) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 18 | 0.29 | 0.13 | 0.27 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2 | 18 | 0.27 | 0.08 | 0.32 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3 | 18 | 0.27 | 0.08 | 0.32 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 18 | 0.2 | 0.08 | 0.18 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 18 | 0.2 | 0.08 | 0.18 |
| (1,527) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 18 | 0.19 | 0.05 | 0.17 |
| (2,226) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 18 | 0.19 | 0.05 | 0.17 |
| (2,537) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 18 | 0.19 | 0.05 | 0.17 |
| (1,348) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 18 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (1,465) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 17 | 0.76 | 0.04 | 0.77 |
| (2,75) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 17 | 0.76 | 0.04 | 0.77 |
| (2,475) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 17 | 0.76 | 0.04 | 0.77 |
| (1,789) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 17 | 0.5 | 0.08 | 0.51 |
| (2,462) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 17 | 0.5 | 0.08 | 0.51 |
| (2,814) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 17 | 0.5 | 0.08 | 0.51 |
| (1,678) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 17 | 0.31 | 0.06 | 0.31 |
| (2,390) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 17 | 0.31 | 0.06 | 0.31 |
| (2,702) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 17 | 0.31 | 0.06 | 0.31 |
| (1,769) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 17 | 0.27 | 0.12 | 0.23 |
| (2,461) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 17 | 0.27 | 0.12 | 0.23 |
| (2,794) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 17 | 0.27 | 0.12 | 0.23 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HG2 | 17 | 0.22 | 0.09 | 0.18 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HG2 | 17 | 0.22 | 0.09 | 0.18 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HG2 | 17 | 0.22 | 0.09 | 0.18 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.22 | 0.09 | 0.18 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.22 | 0.09 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.22 | 0.09 | 0.18 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 17 | 0.19 | 0.07 | 0.19 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 17 | 0.19 | 0.07 | 0.19 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 17 | 0.19 | 0.07 | 0.19 |
| (1,647) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 17 | 0.15 | 0.04 | 0.15 |
| (2,344) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 17 | 0.15 | 0.04 | 0.15 |
| (2,667) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 17 | 0.15 | 0.04 | 0.15 |
| (1,468) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 17 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,78) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 17 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,478) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 17 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,900) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 16 | 0.43 | 0.03 | 0.43 |
| (2,156) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 16 | 0.43 | 0.03 | 0.43 |
| (2,926) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 16 | 0.43 | 0.03 | 0.43 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:H | 16 | 0.31 | 0.1 | 0.3 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:H | 16 | 0.31 | 0.1 | 0.3 |
| (1,497) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 15 | 0.33 | 0.13 | 0.38 |
| (2,354) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 15 | 0.33 | 0.13 | 0.38 |
| (2,507) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 15 | 0.33 | 0.13 | 0.38 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:H | 15 | 0.27 | 0.1 | 0.34 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 15 | 0.27 | 0.1 | 0.34 |
| (1,866) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 15 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (2,33) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 15 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (2,892) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 15 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (1,466) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 15 | 0.16 | 0.06 | 0.15 |
| (2,76) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 15 | 0.16 | 0.06 | 0.15 |
| (2,476) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 15 | 0.16 | 0.06 | 0.15 |
| (1,566) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 14 | 0.65 | 0.47 | 0.5 |
| (2,315) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 14 | 0.65 | 0.47 | 0.5 |
| (2,582) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 14 | 0.65 | 0.47 | 0.5 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 14 | 0.24 | 0.11 | 0.2 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 14 | 0.24 | 0.11 | 0.2 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 14 | 0.24 | 0.11 | 0.2 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 14 | 0.24 | 0.11 | 0.2 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 14 | 0.24 | 0.11 | 0.2 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 14 | 0.24 | 0.11 | 0.2 |
| (1,486) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 14 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,271) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 14 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,496) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 14 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 13 | 0.61 | 0.57 | 0.18 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 13 | 0.61 | 0.57 | 0.18 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 13 | 0.61 | 0.57 | 0.18 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 13 | 0.61 | 0.57 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 13 | 0.61 | 0.57 | 0.18 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 13 | 0.61 | 0.57 | 0.18 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 13 | 0.61 | 0.57 | 0.18 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 13 | 0.61 | 0.57 | 0.18 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 13 | 0.61 | 0.57 | 0.18 |
| (1,878) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 13 | 0.16 | 0.06 | 0.14 |
| (2,168) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 13 | 0.16 | 0.06 | 0.14 |
| (2,904) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 13 | 0.16 | 0.06 | 0.14 |
| (1,792) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 13 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (2,3) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 13 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (2,818) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 13 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,666) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 13 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (2,196) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 13 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (2,689) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 13 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,816) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 13 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (2,341) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 13 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (2,842) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 13 | 0.14 | 0.03 | 0.12 |
| (1,665) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 13 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,395) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 13 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,688) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 13 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,230) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:25:GLN:HG3 | 12 | 0.29 | 0.04 | 0.3 |
| (1,196) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:HA | 12 | 0.27 | 0.26 | 0.2 |
| (1,592) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 12 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |
| (2,36) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 12 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |
| (2,609) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 12 | 0.13 | 0.03 | 0.12 |
| (1,725) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,368) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,750) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 12 | 0.12 | 0.01 | 0.11 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 11 | 1.35 | 0.44 | 1.29 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 11 | 1.35 | 0.44 | 1.29 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 11 | 1.35 | 0.44 | 1.29 |
| (1,550) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 11 | 0.86 | 0.06 | 0.87 |
| (1,669) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 11 | 0.86 | 0.05 | 0.85 |
| (2,191) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 11 | 0.86 | 0.05 | 0.85 |
| (2,195) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 11 | 0.86 | 0.06 | 0.87 |
| (2,560) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 11 | 0.86 | 0.06 | 0.87 |
| (2,692) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 11 | 0.86 | 0.05 | 0.85 |
| (1,404) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 11 | 0.76 | 0.04 | 0.74 |
| (1,173) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 11 | 0.7 | 0.09 | 0.66 |
| (1,150) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 11 | 0.62 | 0.38 | 0.79 |
| (1,291) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:13:CYS:HB3 | 11 | 0.43 | 0.01 | 0.43 |
| (1,584) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 11 | 0.43 | 0.05 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,186) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 11 | 0.43 | 0.05 | 0.44 |
| (2,601) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 11 | 0.43 | 0.05 | 0.44 |
| (1,775) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 11 | 0.29 | 0.02 | 0.29 |
| (2,221) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 11 | 0.29 | 0.02 | 0.29 |
| (2,800) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 11 | 0.29 | 0.02 | 0.29 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:HA | 11 | 0.29 | 0.11 | 0.29 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:HA | 11 | 0.29 | 0.11 | 0.29 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG3 | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG2 | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB3 | 11 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB2 | 11 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD22 | 1:A:30:LEU:HA | 10 | 0.87 | 0.58 | 1.3 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD21 | 1:A:30:LEU:HA | 10 | 0.87 | 0.58 | 1.3 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD23 | 1:A:30:LEU:HA | 10 | 0.87 | 0.58 | 1.3 |
| (1,777) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 10 | 0.62 | 0.06 | 0.6 |
| (2,359) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 10 | 0.62 | 0.06 | 0.6 |
| (2,802) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 10 | 0.62 | 0.06 | 0.6 |
| (1,136) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 10 | 0.57 | 0.03 | 0.57 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG21 | 1:A:12:GLN:HE22 | 10 | 0.56 | 0.52 | 0.43 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG22 | 1:A:12:GLN:HE22 | 10 | 0.56 | 0.52 | 0.43 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG23 | 1:A:12:GLN:HE22 | 10 | 0.56 | 0.52 | 0.43 |
| (1,95) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB3 | 10 | 0.29 | 0.0 | 0.29 |
| (1,378) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 10 | 0.22 | 0.08 | 0.28 |
| (1,578) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 10 | 0.17 | 0.04 | 0.15 |
| (2,2) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 10 | 0.17 | 0.04 | 0.15 |
| (2,595) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 10 | 0.17 | 0.04 | 0.15 |
| (1,855) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,314) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,881) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 10 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 9 | 0.39 | 0.09 | 0.34 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 9 | 0.39 | 0.09 | 0.34 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 9 | 0.39 | 0.09 | 0.34 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 9 | 0.19 | 0.1 | 0.14 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 9 | 0.19 | 0.1 | 0.14 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 9 | 0.19 | 0.1 | 0.14 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 9 | 0.19 | 0.1 | 0.14 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 9 | 0.19 | 0.1 | 0.14 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 9 | 0.19 | 0.1 | 0.14 |
| (1,636) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 9 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (2,198) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 9 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (2,655) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 9 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:21:ASP:HA | 9 | 0.15 | 0.03 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:21:ASP:HA | 9 | 0.15 | 0.03 | 0.13 |
| (1,540) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 9 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (2,7) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 9 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (2,550) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 9 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,96) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB2 | 8 | 0.39 | 0.01 | 0.39 |
| (1,824) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 8 | 0.34 | 0.06 | 0.34 |
| (2,5) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 8 | 0.34 | 0.06 | 0.34 |
| (2,850) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 8 | 0.34 | 0.06 | 0.34 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 8 | 0.32 | 0.06 | 0.3 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 8 | 0.32 | 0.06 | 0.3 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 8 | 0.32 | 0.06 | 0.3 |
| (1,320) | 1:A:28:SER:H | 1:A:28:SER:HB3 | 8 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (1,679) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 8 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,445) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 8 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,703) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 8 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,559) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 7 | 0.2 | 0.08 | 0.16 |
| (2,181) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 7 | 0.2 | 0.08 | 0.16 |
| (2,570) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 7 | 0.2 | 0.08 | 0.16 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 7 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 7 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 7 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,590) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 7 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (2,436) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 7 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (2,607) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 7 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 6 | 2.13 | 0.65 | 2.41 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 6 | 2.13 | 0.65 | 2.41 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 6 | 2.13 | 0.65 | 2.41 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 6 | 1.84 | 0.48 | 2.0 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 6 | 1.84 | 0.48 | 2.0 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 6 | 1.84 | 0.48 | 2.0 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 6 | 0.63 | 0.07 | 0.61 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 6 | 0.63 | 0.07 | 0.61 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 6 | 0.63 | 0.07 | 0.61 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 6 | 0.63 | 0.07 | 0.61 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 6 | 0.63 | 0.07 | 0.61 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 6 | 0.63 | 0.07 | 0.61 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 6 | 0.63 | 0.07 | 0.61 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 6 | 0.63 | 0.07 | 0.61 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 6 | 0.63 | 0.07 | 0.61 |
| (1,414) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:5:GLN:HB3 | 6 | 0.56 | 0.3 | 0.57 |
| (1,189) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 6 | 0.46 | 0.2 | 0.45 |
| (1,151) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB3 | 6 | 0.42 | 0.32 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,512) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 6 | 0.38 | 0.08 | 0.42 |
| (2,420) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 6 | 0.38 | 0.08 | 0.42 |
| (2,522) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 6 | 0.38 | 0.08 | 0.42 |
| (1,612) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 6 | 0.37 | 0.06 | 0.38 |
| (2,428) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 6 | 0.37 | 0.06 | 0.38 |
| (2,631) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 6 | 0.37 | 0.06 | 0.38 |
| (1,82) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB3 | 6 | 0.26 | 0.07 | 0.26 |
| (1,82) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB3 | 6 | 0.26 | 0.07 | 0.26 |
| (1,283) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:11:GLU:HB2 | 6 | 0.25 | 0.01 | 0.25 |
| (1,132) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HB2 | 6 | 0.22 | 0.05 | 0.24 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 6 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 6 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 6 | 0.17 | 0.01 | 0.17 |
| (1,996) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 6 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (1,996) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 6 | 0.16 | 0.03 | 0.15 |
| (1,835) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 6 | 0.13 | 0.02 | 0.14 |
| (2,45) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 6 | 0.13 | 0.02 | 0.14 |
| (2,861) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 6 | 0.13 | 0.02 | 0.14 |
| (1,790) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,790) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,312) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,312) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,815) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,815) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:30:LEU:H | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:30:LEU:H | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:30:LEU:H | 6 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,120) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 1.7 | 0.09 | 1.73 |
| (2,120) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 1.7 | 0.09 | 1.73 |
| (2,120) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 1.7 | 0.09 | 1.73 |
| (2,626) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 1.7 | 0.09 | 1.73 |
| (2,626) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 1.7 | 0.09 | 1.73 |
| (2,626) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 1.7 | 0.09 | 1.73 |
| (1,162) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 1.55 | 0.22 | 1.55 |
| (1,162) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 1.55 | 0.22 | 1.55 |
| (1,162) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 1.55 | 0.22 | 1.55 |
| (1,509) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 0.72 | 0.03 | 0.71 |
| (1,509) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 0.72 | 0.03 | 0.71 |
| (1,509) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 0.72 | 0.03 | 0.71 |
| (2,417) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 0.72 | 0.03 | 0.71 |
| (2,417) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 0.72 | 0.03 | 0.71 |
| (2,417) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 0.72 | 0.03 | 0.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,519) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 0.72 | 0.03 | 0.71 |
| (2,519) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 0.72 | 0.03 | 0.71 |
| (2,519) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 0.72 | 0.03 | 0.71 |
| (1,687) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:H | 5 | 0.57 | 0.01 | 0.57 |
| (2,460) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:H | 5 | 0.57 | 0.01 | 0.57 |
| (2,711) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:H | 5 | 0.57 | 0.01 | 0.57 |
| (1,154) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:20:PHE:HA | 5 | 0.56 | 0.06 | 0.53 |
| (1,709) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 5 | 0.48 | 0.04 | 0.48 |
| (2,323) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 5 | 0.48 | 0.04 | 0.48 |
| (2,733) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 5 | 0.48 | 0.04 | 0.48 |
| (1,743) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 5 | 0.44 | 0.25 | 0.32 |
| (2,164) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 5 | 0.44 | 0.25 | 0.32 |
| (2,768) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 5 | 0.44 | 0.25 | 0.32 |
| (1,170) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 5 | 0.28 | 0.16 | 0.18 |
| (1,170) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 5 | 0.28 | 0.16 | 0.18 |
| (1,170) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 5 | 0.28 | 0.16 | 0.18 |
| (1,659) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 5 | 0.27 | 0.02 | 0.28 |
| (2,317) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 5 | 0.27 | 0.02 | 0.28 |
| (2,682) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 5 | 0.27 | 0.02 | 0.28 |
| (1,710) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD21 | 5 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,710) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD22 | 5 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,710) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD23 | 5 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (2,433) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD21 | 5 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (2,433) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD22 | 5 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (2,433) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD23 | 5 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (2,734) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD21 | 5 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (2,734) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD22 | 5 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (2,734) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD23 | 5 | 0.22 | 0.02 | 0.22 |
| (1,1027) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 5 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (1,1027) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 5 | 0.18 | 0.01 | 0.18 |
| (1,554) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 5 | 0.17 | 0.06 | 0.15 |
| (1,554) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 5 | 0.17 | 0.06 | 0.15 |
| (1,554) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 5 | 0.17 | 0.06 | 0.15 |
| (2,65) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 5 | 0.17 | 0.06 | 0.15 |
| (2,65) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 5 | 0.17 | 0.06 | 0.15 |
| (2,65) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 5 | 0.17 | 0.06 | 0.15 |
| (2,564) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 5 | 0.17 | 0.06 | 0.15 |
| (2,564) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 5 | 0.17 | 0.06 | 0.15 |
| (2,564) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 5 | 0.17 | 0.06 | 0.15 |
| (1,896) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:10:TYR:H | 5 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (1,896) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:10:TYR:H | 5 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (2,138) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:10:TYR:H | 5 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,138) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:10:TYR:H | 5 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (2,922) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:10:TYR:H | 5 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (2,922) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:10:TYR:H | 5 | 0.16 | 0.02 | 0.17 |
| (1,788) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H | 5 | 0.15 | 0.01 | 0.14 |
| (2,234) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H | 5 | 0.15 | 0.01 | 0.14 |
| (2,813) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H | 5 | 0.15 | 0.01 | 0.14 |
| (1,116) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,116) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,116) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 0.13 | 0.0 | 0.13 |
| (1,874) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:H | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,874) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:H | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,874) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:H | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,246) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:H | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,246) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:H | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,246) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:H | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,900) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:H | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,900) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:H | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (2,900) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:H | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,175) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:10:TYR:HA | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,175) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:10:TYR:HA | 5 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,641) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 4 | 1.13 | 0.21 | 1.06 |
| (2,31) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 4 | 1.13 | 0.21 | 1.06 |
| (2,660) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 4 | 1.13 | 0.21 | 1.06 |
| (1,432) | 1:A:26:MET:HB3 | 1:A:23:CYS:HA | 4 | 0.85 | 0.05 | 0.85 |
| (1,1013) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:2:SER:HB2 | 4 | 0.8 | 0.21 | 0.86 |
| (1,1013) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:2:SER:HB2 | 4 | 0.8 | 0.21 | 0.86 |
| (1,499) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE1 | 4 | 0.65 | 0.01 | 0.66 |
| (1,499) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE2 | 4 | 0.65 | 0.01 | 0.66 |
| (1,499) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE3 | 4 | 0.65 | 0.01 | 0.66 |
| (2,363) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE1 | 4 | 0.65 | 0.01 | 0.66 |
| (2,363) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE2 | 4 | 0.65 | 0.01 | 0.66 |
| (2,363) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE3 | 4 | 0.65 | 0.01 | 0.66 |
| (2,509) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE1 | 4 | 0.65 | 0.01 | 0.66 |
| (2,509) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE2 | 4 | 0.65 | 0.01 | 0.66 |
| (2,509) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE3 | 4 | 0.65 | 0.01 | 0.66 |
| (1,233) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HB3 | 4 | 0.65 | 0.01 | 0.65 |
| (1,831) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HA | 4 | 0.64 | 0.01 | 0.64 |
| (2,371) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HA | 4 | 0.64 | 0.01 | 0.64 |
| (2,857) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HA | 4 | 0.64 | 0.01 | 0.64 |
| (1,783) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE1 | 4 | 0.6 | 0.01 | 0.6 |
| (1,783) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE2 | 4 | 0.6 | 0.01 | 0.6 |
| (1,783) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE3 | 4 | 0.6 | 0.01 | 0.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,370) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE1 | 4 | 0.6 | 0.01 | 0.6 |
| (2,370) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE2 | 4 | 0.6 | 0.01 | 0.6 |
| (2,370) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE3 | 4 | 0.6 | 0.01 | 0.6 |
| (2,808) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE1 | 4 | 0.6 | 0.01 | 0.6 |
| (2,808) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE2 | 4 | 0.6 | 0.01 | 0.6 |
| (2,808) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE3 | 4 | 0.6 | 0.01 | 0.6 |
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:HE21 | 4 | 0.51 | 0.04 | 0.53 |
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:HE21 | 4 | 0.51 | 0.04 | 0.53 |
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.51 | 0.04 | 0.53 |
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.51 | 0.04 | 0.53 |
| (1,782) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 4 | 0.36 | 0.14 | 0.4 |
| (2,377) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 4 | 0.36 | 0.14 | 0.4 |
| (2,807) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 4 | 0.36 | 0.14 | 0.4 |
| (1,544) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 4 | 0.29 | 0.15 | 0.25 |
| (2,102) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 4 | 0.29 | 0.15 | 0.25 |
| (2,554) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 4 | 0.29 | 0.15 | 0.25 |
| (1,760) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB2 | 4 | 0.2 | 0.05 | 0.2 |
| (2,287) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB2 | 4 | 0.2 | 0.05 | 0.2 |
| (2,785) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB2 | 4 | 0.2 | 0.05 | 0.2 |
| (1,922) | 1:A:4:GLN:HA | 1:A:4:GLN:HG2 | 4 | 0.18 | 0.04 | 0.2 |
| (1,922) | 1:A:4:GLN:HA | 1:A:4:GLN:HG3 | 4 | 0.18 | 0.04 | 0.2 |
| (1,742) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.16 |
| (1,742) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.16 |
| (2,149) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.16 |
| (2,149) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.16 |
| (2,767) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.16 |
| (2,767) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.16 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG11 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG12 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG13 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG11 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG12 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG13 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG11 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG12 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG13 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,545) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 4 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (2,286) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 4 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (2,555) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 4 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (1,752) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:H | 4 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,48) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:H | 4 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (2,777) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:H | 4 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,605) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 4 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (2,141) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 4 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (2,622) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 4 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,146) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 4 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,146) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 4 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,146) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 4 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,883) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,95) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,909) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,294) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:10:TYR:HA | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,444) | 1:A:16:ASN:HD22 | 1:A:12:GLN:HB3 | 3 | 1.28 | 0.8 | 1.64 |
| (1,160) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:27:CYS:HB3 | 3 | 0.82 | 0.17 | 0.7 |
| (1,451) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:15:VAL:HG22 | 3 | 0.67 | 0.44 | 0.6 |
| (1,451) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:15:VAL:HG21 | 3 | 0.67 | 0.44 | 0.6 |
| (1,451) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:15:VAL:HG23 | 3 | 0.67 | 0.44 | 0.6 |
| (1,500) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HA | 3 | 0.36 | 0.02 | 0.36 |
| (2,379) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HA | 3 | 0.36 | 0.02 | 0.36 |
| (2,510) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HA | 3 | 0.36 | 0.02 | 0.36 |
| (1,305) | 1:A:17:LYS:H | 1:A:14:ASN:HA | 3 | 0.26 | 0.02 | 0.27 |
| (1,482) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 3 | 0.25 | 0.11 | 0.23 |
| (1,482) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 3 | 0.25 | 0.11 | 0.23 |
| (2,147) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 3 | 0.25 | 0.11 | 0.23 |
| (2,147) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 3 | 0.25 | 0.11 | 0.23 |
| (2,492) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 3 | 0.25 | 0.11 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,492) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 3 | 0.25 | 0.11 | 0.23 |
| (2,588) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 3 | 0.2 | 0.09 | 0.15 |
| (2,588) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 3 | 0.2 | 0.09 | 0.15 |
| (2,588) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 3 | 0.2 | 0.09 | 0.15 |
| (1,180) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:17:LYS:HA | 3 | 0.18 | 0.06 | 0.15 |
| (1,712) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:H | 3 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,219) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:H | 3 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (2,736) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:H | 3 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,837) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:32:ARG:H | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,455) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:32:ARG:H | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,863) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:32:ARG:H | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,420) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:29:PRO:HD3 | 3 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (1,529) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HA | 2 | 0.93 | 0.03 | 0.93 |
| (2,228) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HA | 2 | 0.93 | 0.03 | 0.93 |
| (2,539) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HA | 2 | 0.93 | 0.03 | 0.93 |
| (2,629) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 2 | 0.82 | 0.1 | 0.82 |
| (2,629) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 2 | 0.82 | 0.1 | 0.82 |
| (2,629) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 2 | 0.82 | 0.1 | 0.82 |
| (1,167) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.77 | 0.06 | 0.77 |
| (1,167) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.77 | 0.06 | 0.77 |
| (1,167) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.77 | 0.06 | 0.77 |
| (1,469) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 2 | 0.48 | 0.02 | 0.48 |
| (1,469) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 2 | 0.48 | 0.02 | 0.48 |
| (2,79) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 2 | 0.48 | 0.02 | 0.48 |
| (2,79) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 2 | 0.48 | 0.02 | 0.48 |
| (2,479) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 2 | 0.48 | 0.02 | 0.48 |
| (2,479) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 2 | 0.48 | 0.02 | 0.48 |
| (1,252) | 1:A:2:SER:H | 1:A:3:PRO:HG3 | 2 | 0.28 | 0.09 | 0.28 |
| (1,77) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:25:GLN:HA | 2 | 0.26 | 0.02 | 0.26 |
| (1,77) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:25:GLN:HA | 2 | 0.26 | 0.02 | 0.26 |
| (1,819) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:16:ASN:H | 2 | 0.25 | 0.03 | 0.25 |
| (2,222) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:16:ASN:H | 2 | 0.25 | 0.03 | 0.25 |
| (2,845) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:16:ASN:H | 2 | 0.25 | 0.03 | 0.25 |
| (1,52) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 2 | 0.24 | 0.04 | 0.24 |
| (1,52) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 2 | 0.24 | 0.04 | 0.24 |
| (1,886) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB3 | 2 | 0.24 | 0.11 | 0.24 |
| (2,104) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB3 | 2 | 0.24 | 0.11 | 0.24 |
| (2,912) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB3 | 2 | 0.24 | 0.11 | 0.24 |
| (1,159) | 1:A:18:VAL:HB | 1:A:19:PRO:HD3 | 2 | 0.2 | 0.08 | 0.2 |
| (1,301) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:14:ASN:HB3 | 2 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (1,491) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 2 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (1,491) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 2 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,349) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 2 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (2,349) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 2 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (2,501) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 2 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (2,501) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 2 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (1,323) | 1:A:27:CYS:H | 1:A:26:MET:HE3 | 2 | 0.2 | 0.06 | 0.2 |
| (1,323) | 1:A:27:CYS:H | 1:A:26:MET:HE1 | 2 | 0.2 | 0.06 | 0.2 |
| (1,323) | 1:A:27:CYS:H | 1:A:26:MET:HE2 | 2 | 0.2 | 0.06 | 0.2 |
| (1,917) | 1:A:28:SER:HB3 | 1:A:28:SER:H | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (2,392) | 1:A:28:SER:HB3 | 1:A:28:SER:H | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (2,943) | 1:A:28:SER:HB3 | 1:A:28:SER:H | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,956) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 2 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,956) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 2 | 0.18 | 0.02 | 0.18 |
| (1,774) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB2 | 2 | 0.18 | 0.06 | 0.18 |
| (2,50) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB2 | 2 | 0.18 | 0.06 | 0.18 |
| (2,799) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB2 | 2 | 0.18 | 0.06 | 0.18 |
| (1,564) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (1,564) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (1,564) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (1,564) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (1,564) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (1,564) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,300) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,300) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,300) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,300) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,300) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,300) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,579) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,579) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,579) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,579) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,579) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (2,579) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.17 | 0.02 | 0.17 |
| (1,1030) | 1:A:8:TYR:HD1 | 1:A:11:GLU:HB2 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1030) | 1:A:8:TYR:HD2 | 1:A:11:GLU:HB2 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1030) | 1:A:8:TYR:HD1 | 1:A:12:GLN:HG3 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1030) | 1:A:8:TYR:HD2 | 1:A:12:GLN:HG3 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1030) | 1:A:8:TYR:HD1 | 1:A:12:GLN:HG2 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1030) | 1:A:8:TYR:HD2 | 1:A:12:GLN:HG2 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,393) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 2 | 0.15 | 0.0 | 0.15 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

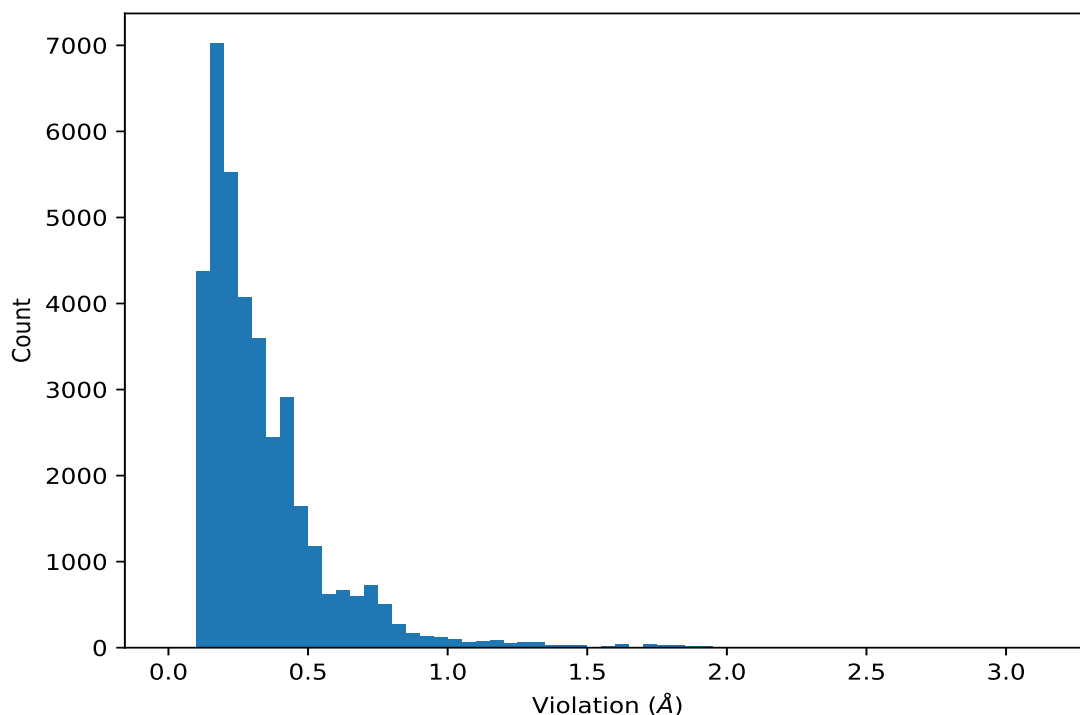
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|---------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,683) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,113) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (2,707) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,218) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:23:CYS:HB3 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,811) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:4:GLN:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,811) | 1:A:4:GLN:HB3 | 1:A:4:GLN:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,28) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:4:GLN:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,28) | 1:A:4:GLN:HB3 | 1:A:4:GLN:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,837) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:4:GLN:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (2,837) | 1:A:4:GLN:HB3 | 1:A:4:GLN:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,614) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,429) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HA | 2 | 0.11 | 0.0 | 0.11 |
| (2,633) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU: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) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:14:ASN:HB3 | 40 | 3.15 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:14:ASN:HB3 | 40 | 3.15 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:14:ASN:HB3 | 40 | 3.15 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 2.62 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 2.54 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 2.54 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 2.54 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 2.51 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 2.46 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 2.46 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 2.46 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 2.45 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 2.45 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 2.45 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 2.37 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 2.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 2.36 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 2.36 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 2.36 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 2.34 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 2.28 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 2.28 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 2.28 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 2.28 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 2.25 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 2.22 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 2.19 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 2.19 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 2.19 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 2.17 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 2.13 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 2.13 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 2.13 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 2.12 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 2.12 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 4 | 2.09 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 24 | 2.07 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 24 | 2.07 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 24 | 2.07 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG21 | 1:A:12:GLN:HE22 | 49 | 2.06 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG22 | 1:A:12:GLN:HE22 | 49 | 2.06 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG23 | 1:A:12:GLN:HE22 | 49 | 2.06 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 37 | 2.05 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 37 | 2.05 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 37 | 2.05 |
| (1,444) | 1:A:16:ASN:HD22 | 1:A:12:GLN:HB3 | 32 | 2.03 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 2.01 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 2.01 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 2.01 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 7 | 2.0 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 7 | 2.0 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 43 | 2.0 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 2.0 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 2.0 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 2.0 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 15 | 1.99 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 29 | 1.98 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 1.97 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 43 | 1.95 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 43 | 1.95 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 27 | 1.94 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 27 | 1.94 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 35 | 1.94 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 35 | 1.94 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 1.94 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 1.94 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 1.94 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 3 | 1.93 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 47 | 1.92 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 47 | 1.92 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 13 | 1.91 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 13 | 1.91 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 1.9 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 48 | 1.9 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 48 | 1.9 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 50 | 1.9 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 1.89 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 45 | 1.89 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 45 | 1.89 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 16 | 1.88 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 16 | 1.88 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 41 | 1.88 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 2 | 1.86 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 2 | 1.86 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 6 | 1.86 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 6 | 1.86 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 16 | 1.86 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 20 | 1.86 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 30 | 1.85 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 30 | 1.85 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 2 | 1.85 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 48 | 1.85 |
| (1,162) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 1.85 |
| (1,162) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 1.85 |
| (1,162) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 1.85 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 1.84 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 3 | 1.84 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 3 | 1.84 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 10 | 1.84 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 10 | 1.84 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 14 | 1.84 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 35 | 1.84 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 36 | 1.84 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 20 | 1.83 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 20 | 1.83 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 25 | 1.83 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 25 | 1.83 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 1.82 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 1.82 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 1.82 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 1.82 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 1.82 |
| (2,626) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 1.82 |
| (2,626) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 1.82 |
| (2,626) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 1.82 |
| (2,120) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 1.82 |
| (2,120) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 1.82 |
| (2,120) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 1.82 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 24 | 1.82 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 24 | 1.82 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 37 | 1.82 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 9 | 1.81 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 1.8 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 1.8 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 1.8 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 1.8 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 26 | 1.8 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 1.79 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 19 | 1.79 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 19 | 1.79 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 33 | 1.79 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 33 | 1.79 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 34 | 1.79 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 34 | 1.79 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 38 | 1.79 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 38 | 1.79 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 19 | 1.79 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 21 | 1.79 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 1.77 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 1.77 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 41 | 1.77 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 41 | 1.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 8 | 1.77 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 33 | 1.77 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 1.76 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 1.76 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 26 | 1.76 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 26 | 1.76 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 36 | 1.76 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 36 | 1.76 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 49 | 1.76 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 49 | 1.76 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 42 | 1.76 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 1.75 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 1 | 1.75 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 1 | 1.75 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 31 | 1.75 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 1.74 |
| (2,626) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 1.74 |
| (2,626) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 1.74 |
| (2,626) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 1.74 |
| (2,120) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 1.74 |
| (2,120) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 1.74 |
| (2,120) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 1.74 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 8 | 1.74 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 8 | 1.74 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 39 | 1.74 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 39 | 1.74 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 24 | 1.74 |
| (2,626) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 1.73 |
| (2,626) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 1.73 |
| (2,626) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 1.73 |
| (2,120) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 1.73 |
| (2,120) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 1.73 |
| (2,120) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 1.73 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:14:ASN:HB3 | 24 | 1.73 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:14:ASN:HB3 | 24 | 1.73 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:14:ASN:HB3 | 24 | 1.73 |
| (1,162) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 1.73 |
| (1,162) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 1.73 |
| (1,162) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 1.73 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 50 | 1.72 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 50 | 1.72 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 1.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 31 | 1.71 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 31 | 1.71 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 37 | 1.71 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 37 | 1.71 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 45 | 1.71 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 9 | 1.7 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 9 | 1.7 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 21 | 1.7 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 21 | 1.7 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 7 | 1.7 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 1.69 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 42 | 1.68 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 42 | 1.68 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 32 | 1.67 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 32 | 1.67 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 44 | 1.67 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 44 | 1.67 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 1.66 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 1.66 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 39 | 1.66 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 1.65 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 1.64 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 1.64 |
| (2,626) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 1.64 |
| (2,626) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 1.64 |
| (2,626) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 1.64 |
| (2,120) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 1.64 |
| (2,120) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 1.64 |
| (2,120) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 1.64 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 4 | 1.64 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 4 | 1.64 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 12 | 1.64 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 12 | 1.64 |
| (1,444) | 1:A:16:ASN:HD22 | 1:A:12:GLN:HB3 | 44 | 1.64 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 1.63 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 1.63 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 1.63 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 17 | 1.63 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 17 | 1.63 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 3 | 1.63 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 1.62 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 1.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 22 | 1.62 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 22 | 1.62 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 1.61 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 1.61 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 7 | 1.61 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 7 | 1.61 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 7 | 1.61 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 5 | 1.61 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 5 | 1.61 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 28 | 1.61 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 28 | 1.61 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 1.6 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 1.6 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 15 | 1.6 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 15 | 1.6 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 18 | 1.6 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 18 | 1.6 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:14:ASN:HB3 | 37 | 1.6 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:14:ASN:HB3 | 37 | 1.6 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:14:ASN:HB3 | 37 | 1.6 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 1.58 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 1.57 |
| (2,626) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 1.56 |
| (2,626) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 1.56 |
| (2,626) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 1.56 |
| (2,120) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 1.56 |
| (2,120) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 1.56 |
| (2,120) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 1.56 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 1.55 |
| (1,162) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 1.55 |
| (1,162) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 1.55 |
| (1,162) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 1.55 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 14 | 1.51 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 14 | 1.51 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 23 | 1.51 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 23 | 1.51 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 46 | 1.5 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 46 | 1.5 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD22 | 1:A:30:LEU:HA | 37 | 1.5 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD21 | 1:A:30:LEU:HA | 37 | 1.5 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD23 | 1:A:30:LEU:HA | 37 | 1.5 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 4 | 1.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 4 | 1.48 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 40 | 1.48 |
| (2,660) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 14 | 1.47 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 18 | 1.47 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 18 | 1.47 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 18 | 1.47 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 40 | 1.47 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 40 | 1.47 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 40 | 1.47 |
| (2,31) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 14 | 1.47 |
| (1,641) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 14 | 1.47 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 1.46 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 1.46 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 1.46 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 1.46 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 1.46 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 1.46 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 1.46 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 1.46 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 1.46 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 28 | 1.46 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 10 | 1.45 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 10 | 1.45 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 10 | 1.45 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 26 | 1.44 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 26 | 1.44 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 26 | 1.44 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 38 | 1.43 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 38 | 1.43 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 18 | 1.41 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 1.4 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 1.4 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 1.4 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 1.4 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 1.4 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 1.4 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 1.4 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 22 | 1.4 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 22 | 1.4 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 29 | 1.4 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 29 | 1.4 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 1.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 1.4 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 1.4 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 50 | 1.4 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 50 | 1.4 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 50 | 1.4 |
| (1,162) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 1.4 |
| (1,162) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 1.4 |
| (1,162) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 1.4 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 1.39 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 1.39 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 1.39 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 19 | 1.39 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 19 | 1.39 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 19 | 1.39 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 30 | 1.39 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 30 | 1.39 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 30 | 1.39 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 26 | 1.39 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 46 | 1.38 |
| (2,582) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 22 | 1.37 |
| (2,315) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 22 | 1.37 |
| (1,566) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 22 | 1.37 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 8 | 1.37 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 16 | 1.36 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 21 | 1.36 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 21 | 1.36 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 21 | 1.36 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 29 | 1.35 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 29 | 1.35 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 11 | 1.35 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 30 | 1.35 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 36 | 1.35 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 17 | 1.35 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 17 | 1.35 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 17 | 1.35 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 16 | 1.35 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 14 | 1.34 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 16 | 1.34 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 16 | 1.34 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 16 | 1.34 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD22 | 1:A:30:LEU:HA | 39 | 1.34 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD21 | 1:A:30:LEU:HA | 39 | 1.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD23 | 1:A:30:LEU:HA | 39 | 1.34 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 11 | 1.33 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 11 | 1.33 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:8:TYR:HA | 40 | 1.33 |
| (1,992) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:8:TYR:HA | 40 | 1.33 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 12 | 1.33 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 31 | 1.33 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 40 | 1.33 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD22 | 1:A:30:LEU:HA | 5 | 1.33 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD21 | 1:A:30:LEU:HA | 5 | 1.33 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD23 | 1:A:30:LEU:HA | 5 | 1.33 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 5 | 1.32 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 5 | 1.32 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 5 | 1.32 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 18 | 1.32 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 12 | 1.32 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 12 | 1.32 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 12 | 1.32 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 36 | 1.32 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 36 | 1.32 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 36 | 1.32 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 39 | 1.32 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 39 | 1.32 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 39 | 1.32 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 40 | 1.32 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 40 | 1.32 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 40 | 1.32 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 31 | 1.32 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 37 | 1.32 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 30 | 1.31 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 30 | 1.31 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 30 | 1.31 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 1.31 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 1.31 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 1.31 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 24 | 1.31 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 24 | 1.31 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 24 | 1.31 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 45 | 1.31 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 45 | 1.31 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 45 | 1.31 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 27 | 1.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD22 | 1:A:30:LEU:HA | 4 | 1.31 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD21 | 1:A:30:LEU:HA | 4 | 1.31 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD23 | 1:A:30:LEU:HA | 4 | 1.31 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD22 | 1:A:30:LEU:HA | 49 | 1.31 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD21 | 1:A:30:LEU:HA | 49 | 1.31 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD23 | 1:A:30:LEU:HA | 49 | 1.31 |
| (2,582) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 4 | 1.3 |
| (2,315) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 4 | 1.3 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 27 | 1.3 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 27 | 1.3 |
| (1,566) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 4 | 1.3 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 14 | 1.3 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 14 | 1.3 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 14 | 1.3 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 20 | 1.3 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 20 | 1.3 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 20 | 1.3 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 35 | 1.3 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 35 | 1.3 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 35 | 1.3 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 20 | 1.3 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 13 | 1.29 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 13 | 1.29 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 13 | 1.29 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 37 | 1.29 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 37 | 1.29 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 37 | 1.29 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 49 | 1.29 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 49 | 1.29 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 49 | 1.29 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 1 | 1.29 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 5 | 1.29 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD22 | 1:A:30:LEU:HA | 42 | 1.29 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD21 | 1:A:30:LEU:HA | 42 | 1.29 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD23 | 1:A:30:LEU:HA | 42 | 1.29 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 1.28 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 1.28 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 1.28 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 1.28 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 1.28 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 1.28 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 1.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 1.28 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 1.28 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 24 | 1.28 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 1.27 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 1.27 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 1.27 |
| (2,582) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 38 | 1.27 |
| (2,315) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 38 | 1.27 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 1.27 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 1.27 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 1.27 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 1.27 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 1.27 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 1.27 |
| (1,566) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 38 | 1.27 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 1 | 1.27 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 1 | 1.27 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 1 | 1.27 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 11 | 1.27 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 11 | 1.27 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 11 | 1.27 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 27 | 1.27 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 27 | 1.27 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 27 | 1.27 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 7 | 1.27 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 17 | 1.27 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 22 | 1.27 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 3 | 1.26 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 15 | 1.26 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 15 | 1.26 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 15 | 1.26 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 46 | 1.26 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 46 | 1.26 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 46 | 1.26 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 8 | 1.26 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 29 | 1.26 |
| (1,150) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 13 | 1.26 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 34 | 1.25 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 34 | 1.25 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 34 | 1.25 |
| (1,451) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:15:VAL:HG22 | 49 | 1.24 |
| (1,451) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:15:VAL:HG21 | 49 | 1.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,451) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:15:VAL:HG23 | 49 | 1.24 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 47 | 1.24 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 47 | 1.24 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 47 | 1.24 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 23 | 1.24 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 22 | 1.23 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 22 | 1.23 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 22 | 1.23 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 36 | 1.23 |
| (1,162) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 1.23 |
| (1,162) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 1.23 |
| (1,162) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 1.23 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 1.22 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 29 | 1.22 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 29 | 1.22 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 29 | 1.22 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 33 | 1.22 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 33 | 1.22 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 33 | 1.22 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 19 | 1.22 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 39 | 1.22 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 1.21 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 1.21 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 1.21 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 28 | 1.21 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 28 | 1.21 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 1.21 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 1.21 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 1.21 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 1.21 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 1.21 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 1.21 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 28 | 1.21 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 8 | 1.21 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 8 | 1.21 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 8 | 1.21 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 9 | 1.21 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 9 | 1.21 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 9 | 1.21 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 38 | 1.21 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 38 | 1.21 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 38 | 1.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 2 | 1.21 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 33 | 1.21 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 45 | 1.21 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 29 | 1.2 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 29 | 1.2 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 29 | 1.2 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 9 | 1.2 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 35 | 1.2 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 38 | 1.2 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 1.19 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 1.19 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 1.19 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 1.19 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 16 | 1.19 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 16 | 1.19 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 16 | 1.19 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 41 | 1.19 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 41 | 1.19 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 41 | 1.19 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 25 | 1.19 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 25 | 1.19 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 25 | 1.19 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 41 | 1.19 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 41 | 1.19 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 41 | 1.19 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 42 | 1.19 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 42 | 1.19 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 42 | 1.19 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 32 | 1.18 |
| (2,582) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 27 | 1.18 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 28 | 1.18 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 28 | 1.18 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 28 | 1.18 |
| (2,315) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 27 | 1.18 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 32 | 1.18 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 32 | 1.18 |
| (1,566) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 27 | 1.18 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 4 | 1.18 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 4 | 1.18 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 4 | 1.18 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 25 | 1.18 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 25 | 1.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 25 | 1.18 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 43 | 1.18 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 43 | 1.18 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 43 | 1.18 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 47 | 1.17 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 47 | 1.17 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 47 | 1.17 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 31 | 1.17 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 31 | 1.17 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 31 | 1.17 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 9 | 1.17 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 9 | 1.17 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 9 | 1.17 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 35 | 1.17 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 35 | 1.17 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 35 | 1.17 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 36 | 1.17 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 36 | 1.17 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 36 | 1.17 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 45 | 1.17 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 45 | 1.17 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 45 | 1.17 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:14:ASN:HB3 | 7 | 1.17 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:14:ASN:HB3 | 7 | 1.17 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:14:ASN:HB3 | 7 | 1.17 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 11 | 1.17 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 34 | 1.17 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 49 | 1.17 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 1.16 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 1.16 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 1.16 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 1.16 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 15 | 1.16 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 15 | 1.16 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 15 | 1.16 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 20 | 1.16 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 20 | 1.16 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 20 | 1.16 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 21 | 1.16 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 21 | 1.16 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 21 | 1.16 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 2 | 1.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 2 | 1.16 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 2 | 1.16 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 15 | 1.16 |
| (2,660) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 16 | 1.15 |
| (2,31) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 16 | 1.15 |
| (1,641) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 16 | 1.15 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 21 | 1.15 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 21 | 1.15 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 21 | 1.15 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 1.15 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 1.15 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 1.15 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 14 | 1.14 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 14 | 1.14 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 14 | 1.14 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 19 | 1.14 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 19 | 1.14 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 19 | 1.14 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 27 | 1.14 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 27 | 1.14 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 27 | 1.14 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 43 | 1.14 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 43 | 1.14 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 43 | 1.14 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 5 | 1.14 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 5 | 1.14 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 5 | 1.14 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 1.13 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 1.13 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 1.13 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 18 | 1.13 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 18 | 1.13 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 18 | 1.13 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 14 | 1.13 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 21 | 1.13 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 5 | 1.12 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 1.12 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 1.12 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 1.12 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 1.12 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 1.12 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 1.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 5 | 1.12 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 5 | 1.12 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 1.12 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 1.12 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 1.12 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 25 | 1.12 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 25 | 1.12 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 25 | 1.12 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 33 | 1.12 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 33 | 1.12 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 33 | 1.12 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 3 | 1.12 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 3 | 1.12 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 3 | 1.12 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 4 | 1.12 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 4 | 1.12 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 4 | 1.12 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 29 | 1.11 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 29 | 1.11 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 29 | 1.11 |
| (1,196) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:HA | 49 | 1.11 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 1.11 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 1.11 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 1.11 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 28 | 1.11 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 28 | 1.11 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 28 | 1.11 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 37 | 1.1 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 37 | 1.1 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 46 | 1.1 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 46 | 1.1 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 46 | 1.1 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 1 | 1.1 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 1 | 1.1 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 1 | 1.1 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 8 | 1.1 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 8 | 1.1 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 8 | 1.1 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 44 | 1.1 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 44 | 1.1 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 44 | 1.1 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 46 | 1.1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 46 | 1.1 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 46 | 1.1 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 1.09 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 7 | 1.09 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 7 | 1.09 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 7 | 1.09 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 23 | 1.09 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 23 | 1.09 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 23 | 1.09 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 32 | 1.09 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 32 | 1.09 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 32 | 1.09 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 42 | 1.09 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 42 | 1.09 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 42 | 1.09 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 4 | 1.09 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 44 | 1.08 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 34 | 1.08 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 34 | 1.08 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 34 | 1.08 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 7 | 1.08 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 7 | 1.08 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 7 | 1.08 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 13 | 1.08 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 1.07 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 6 | 1.07 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 6 | 1.07 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 6 | 1.07 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 11 | 1.07 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 11 | 1.07 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 11 | 1.07 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 17 | 1.07 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 17 | 1.07 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 17 | 1.07 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 22 | 1.07 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 22 | 1.07 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 22 | 1.07 |
| (1,151) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB3 | 13 | 1.07 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 25 | 1.06 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 27 | 1.06 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 47 | 1.06 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 47 | 1.06 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 47 | 1.06 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 49 | 1.06 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 49 | 1.06 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 49 | 1.06 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 47 | 1.06 |
| (1,160) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:27:CYS:HB3 | 43 | 1.06 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 5 | 1.05 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 5 | 1.05 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 5 | 1.05 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 2 | 1.05 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 5 | 1.05 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 9 | 1.05 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 10 | 1.05 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 17 | 1.05 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 20 | 1.05 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 41 | 1.05 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 43 | 1.05 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 46 | 1.05 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 48 | 1.05 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 50 | 1.05 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 30 | 1.05 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 30 | 1.05 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 30 | 1.05 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 48 | 1.05 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 48 | 1.05 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 48 | 1.05 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 10 | 1.05 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 43 | 1.05 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 6 | 1.04 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 24 | 1.04 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 26 | 1.04 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 32 | 1.04 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 34 | 1.04 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 38 | 1.04 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 39 | 1.04 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 42 | 1.04 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 18 | 1.04 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 18 | 1.04 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 39 | 1.04 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 39 | 1.04 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 39 | 1.04 |
| (2,582) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 29 | 1.03 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,315) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 29 | 1.03 |
| (1,566) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 29 | 1.03 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 1 | 1.03 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 4 | 1.03 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 7 | 1.03 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 35 | 1.03 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 37 | 1.03 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 45 | 1.03 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 47 | 1.03 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 28 | 1.03 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 28 | 1.03 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 28 | 1.03 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 26 | 1.03 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 26 | 1.03 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 26 | 1.03 |
| (1,1013) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:2:SER:HB2 | 24 | 1.03 |
| (1,1013) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:2:SER:HB2 | 24 | 1.03 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 24 | 1.02 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 24 | 1.02 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 24 | 1.02 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 13 | 1.02 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 15 | 1.02 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 21 | 1.02 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 28 | 1.02 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 29 | 1.02 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 6 | 1.02 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 6 | 1.02 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 6 | 1.02 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 3 | 1.02 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 3 | 1.02 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 3 | 1.02 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 12 | 1.02 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 12 | 1.02 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 12 | 1.02 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 31 | 1.02 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 31 | 1.02 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 31 | 1.02 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 42 | 1.02 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 1.01 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 13 | 1.01 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 13 | 1.01 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 13 | 1.01 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 21 | 1.01 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 21 | 1.01 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 21 | 1.01 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 33 | 1.01 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 33 | 1.01 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 33 | 1.01 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 19 | 1.01 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 22 | 1.01 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 23 | 1.01 |
| (1,422) | 1:A:12:GLN:HE22 | 1:A:12:GLN:HB2 | 33 | 1.01 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 10 | 1.01 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 10 | 1.01 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 10 | 1.01 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 48 | 1.01 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 48 | 1.01 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 48 | 1.01 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 6 | 1.01 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 25 | 1.01 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 48 | 1.01 |
| (2,692) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 40 | 1.0 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 35 | 1.0 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 35 | 1.0 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 35 | 1.0 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 1.0 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 1.0 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 1.0 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 1.0 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 1.0 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 1.0 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 1.0 |
| (2,191) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 40 | 1.0 |
| (1,669) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 40 | 1.0 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 1.0 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 1.0 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 1.0 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 6 | 1.0 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 6 | 1.0 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 6 | 1.0 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 41 | 1.0 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 50 | 1.0 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.99 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 31 | 0.99 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 31 | 0.99 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 31 | 0.99 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 31 | 0.99 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 31 | 0.99 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 31 | 0.99 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 24 | 0.99 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 24 | 0.99 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 24 | 0.99 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 23 | 0.99 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 23 | 0.99 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 23 | 0.99 |
| (1,150) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 15 | 0.99 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 19 | 0.98 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 19 | 0.98 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 19 | 0.98 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 30 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 3 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 3 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 3 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 3 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 3 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 3 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 9 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 9 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 9 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 9 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 9 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 9 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 19 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 19 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 19 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 19 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 19 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 19 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 21 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 21 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 21 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 21 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 21 | 0.98 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 21 | 0.98 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 39 | 0.97 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 39 | 0.97 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 39 | 0.97 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 42 | 0.97 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 42 | 0.97 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 42 | 0.97 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.97 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 11 | 0.97 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 11 | 0.97 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 28 | 0.97 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 28 | 0.97 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 11 | 0.97 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 11 | 0.97 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 28 | 0.97 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 28 | 0.97 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 11 | 0.97 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 11 | 0.97 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 28 | 0.97 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 28 | 0.97 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 1 | 0.97 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 1 | 0.97 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 1 | 0.97 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:14:ASN:HB3 | 18 | 0.97 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:14:ASN:HB3 | 18 | 0.97 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:14:ASN:HB3 | 18 | 0.97 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 26 | 0.96 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 26 | 0.96 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 26 | 0.96 |
| (2,660) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 6 | 0.96 |
| (2,660) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 11 | 0.96 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.96 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.96 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.96 |
| (2,539) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HA | 18 | 0.96 |
| (2,31) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 6 | 0.96 |
| (2,31) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 11 | 0.96 |
| (2,228) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HA | 18 | 0.96 |
| (1,641) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 6 | 0.96 |
| (1,641) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 11 | 0.96 |
| (1,529) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HA | 18 | 0.96 |
| (1,172) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:13:CYS:HA | 12 | 0.96 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 34 | 0.96 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 34 | 0.96 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 34 | 0.96 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 34 | 0.96 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 34 | 0.96 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 34 | 0.96 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 50 | 0.96 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 50 | 0.96 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 50 | 0.96 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 50 | 0.96 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 50 | 0.96 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 50 | 0.96 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 4 | 0.95 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 4 | 0.95 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 4 | 0.95 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.95 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 3 | 0.95 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 3 | 0.95 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 3 | 0.95 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 37 | 0.95 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 37 | 0.95 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 37 | 0.95 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 37 | 0.95 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 37 | 0.95 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 37 | 0.95 |
| (1,414) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:5:GLN:HB3 | 27 | 0.95 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 28 | 0.95 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 28 | 0.95 |
| (1,38) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HG3 | 49 | 0.95 |
| (1,38) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HG3 | 49 | 0.95 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 7 | 0.95 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 7 | 0.95 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 7 | 0.95 |
| (1,150) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 10 | 0.95 |
| (1,1013) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:2:SER:HB2 | 7 | 0.95 |
| (1,1013) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:2:SER:HB2 | 7 | 0.95 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.94 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 45 | 0.94 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 45 | 0.94 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 45 | 0.94 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.94 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.94 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 6 | 0.94 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 6 | 0.94 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 9 | 0.94 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 9 | 0.94 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 6 | 0.94 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 6 | 0.94 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 9 | 0.94 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 9 | 0.94 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 6 | 0.94 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 6 | 0.94 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 9 | 0.94 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 9 | 0.94 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 36 | 0.94 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 36 | 0.94 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 36 | 0.94 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 38 | 0.94 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 38 | 0.94 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 38 | 0.94 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 13 | 0.94 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 13 | 0.94 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 13 | 0.94 |
| (2,768) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 3 | 0.93 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.93 |
| (2,560) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 23 | 0.93 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 15 | 0.93 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 15 | 0.93 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 25 | 0.93 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 25 | 0.93 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 15 | 0.93 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 15 | 0.93 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 25 | 0.93 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 25 | 0.93 |
| (2,195) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 23 | 0.93 |
| (2,164) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 3 | 0.93 |
| (1,743) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 3 | 0.93 |
| (1,550) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 23 | 0.93 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 15 | 0.93 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 15 | 0.93 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 25 | 0.93 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 25 | 0.93 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 24 | 0.93 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 24 | 0.93 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 29 | 0.93 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 29 | 0.93 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 29 | 0.93 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 27 | 0.92 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.92 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 15 | 0.92 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 15 | 0.92 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 15 | 0.92 |
| (2,629) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 44 | 0.92 |
| (2,629) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 44 | 0.92 |
| (2,629) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 44 | 0.92 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.92 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.92 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.92 |
| (2,560) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 13 | 0.92 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 50 | 0.92 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 50 | 0.92 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 50 | 0.92 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 50 | 0.92 |
| (2,195) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 13 | 0.92 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 27 | 0.92 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 49 | 0.92 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 49 | 0.92 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 27 | 0.92 |
| (1,550) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 13 | 0.92 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 50 | 0.92 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 50 | 0.92 |
| (1,432) | 1:A:26:MET:HB3 | 1:A:23:CYS:HA | 43 | 0.92 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.91 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.91 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.91 |
| (2,560) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 24 | 0.91 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 14 | 0.91 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 14 | 0.91 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 34 | 0.91 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 34 | 0.91 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 5 | 0.91 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 5 | 0.91 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 14 | 0.91 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 14 | 0.91 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 34 | 0.91 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 34 | 0.91 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 5 | 0.91 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 5 | 0.91 |
| (2,195) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 24 | 0.91 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,550) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 24 | 0.91 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 14 | 0.91 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 14 | 0.91 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 34 | 0.91 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 34 | 0.91 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 5 | 0.91 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 5 | 0.91 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 16 | 0.91 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 16 | 0.91 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 16 | 0.91 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.9 |
| (2,692) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 3 | 0.9 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 19 | 0.9 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 19 | 0.9 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 19 | 0.9 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 25 | 0.9 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 25 | 0.9 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 25 | 0.9 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.9 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.9 |
| (2,560) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 28 | 0.9 |
| (2,539) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HA | 20 | 0.9 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 47 | 0.9 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 47 | 0.9 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 47 | 0.9 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 47 | 0.9 |
| (2,228) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HA | 20 | 0.9 |
| (2,195) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 28 | 0.9 |
| (2,191) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 3 | 0.9 |
| (1,669) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 3 | 0.9 |
| (1,550) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 28 | 0.9 |
| (1,529) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HA | 20 | 0.9 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 47 | 0.9 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 47 | 0.9 |
| (1,414) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:5:GLN:HB3 | 24 | 0.9 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 20 | 0.9 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 20 | 0.9 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 20 | 0.9 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 34 | 0.9 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 34 | 0.9 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 34 | 0.9 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 2 | 0.89 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.89 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 26 | 0.89 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 26 | 0.89 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 44 | 0.89 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 44 | 0.89 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 26 | 0.89 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 26 | 0.89 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 44 | 0.89 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 44 | 0.89 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 2 | 0.89 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 2 | 0.89 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 26 | 0.89 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 26 | 0.89 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 44 | 0.89 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 44 | 0.89 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 38 | 0.89 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 38 | 0.89 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 38 | 0.89 |
| (1,173) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 13 | 0.89 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 26 | 0.88 |
| (2,692) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 5 | 0.88 |
| (2,692) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 13 | 0.88 |
| (2,692) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 23 | 0.88 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 1 | 0.88 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 1 | 0.88 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 1 | 0.88 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 2 | 0.88 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 2 | 0.88 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 2 | 0.88 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.88 |
| (2,560) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 3 | 0.88 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 7 | 0.88 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 7 | 0.88 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 33 | 0.88 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 33 | 0.88 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 7 | 0.88 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 7 | 0.88 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 33 | 0.88 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 33 | 0.88 |
| (2,195) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 3 | 0.88 |
| (2,191) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 5 | 0.88 |
| (2,191) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 13 | 0.88 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,191) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 23 | 0.88 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 26 | 0.88 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 26 | 0.88 |
| (1,669) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 5 | 0.88 |
| (1,669) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 13 | 0.88 |
| (1,669) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 23 | 0.88 |
| (1,550) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 3 | 0.88 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 7 | 0.88 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 7 | 0.88 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 33 | 0.88 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 33 | 0.88 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 44 | 0.88 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 23 | 0.88 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 23 | 0.88 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 23 | 0.88 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 16 | 0.87 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 45 | 0.87 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 3 | 0.87 |
| (2,817) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.87 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.87 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.87 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.87 |
| (2,560) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 31 | 0.87 |
| (2,560) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 37 | 0.87 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 41 | 0.87 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 41 | 0.87 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 41 | 0.87 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 41 | 0.87 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 3 | 0.87 |
| (2,195) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 31 | 0.87 |
| (2,195) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 37 | 0.87 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 16 | 0.87 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 45 | 0.87 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 16 | 0.87 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 45 | 0.87 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 3 | 0.87 |
| (1,550) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 31 | 0.87 |
| (1,550) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 37 | 0.87 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 41 | 0.87 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 41 | 0.87 |
| (1,432) | 1:A:26:MET:HB3 | 1:A:23:CYS:HA | 8 | 0.87 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 27 | 0.87 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 27 | 0.87 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 10 | 0.87 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 28 | 0.87 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 3 | 0.87 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 3 | 0.87 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 3 | 0.87 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 29 | 0.86 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 43 | 0.86 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 37 | 0.86 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.86 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 22 | 0.86 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 22 | 0.86 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 24 | 0.86 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 24 | 0.86 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 49 | 0.86 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 49 | 0.86 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 22 | 0.86 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 22 | 0.86 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 24 | 0.86 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 24 | 0.86 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 49 | 0.86 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 49 | 0.86 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 37 | 0.86 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 29 | 0.86 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 43 | 0.86 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 29 | 0.86 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 43 | 0.86 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 37 | 0.86 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 22 | 0.86 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 22 | 0.86 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 24 | 0.86 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 24 | 0.86 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 49 | 0.86 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 49 | 0.86 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 3 | 0.86 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 3 | 0.86 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 41 | 0.86 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 17 | 0.86 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 17 | 0.86 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 17 | 0.86 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 41 | 0.86 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 41 | 0.86 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 41 | 0.86 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 28 | 0.86 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 28 | 0.86 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 28 | 0.86 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 21 | 0.85 |
| (2,692) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 18 | 0.85 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 27 | 0.85 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 27 | 0.85 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 27 | 0.85 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 34 | 0.85 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 34 | 0.85 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 34 | 0.85 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 41 | 0.85 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 41 | 0.85 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 41 | 0.85 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.85 |
| (2,560) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 5 | 0.85 |
| (2,560) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 18 | 0.85 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 10 | 0.85 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 10 | 0.85 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 10 | 0.85 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 10 | 0.85 |
| (2,195) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 5 | 0.85 |
| (2,195) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 18 | 0.85 |
| (2,191) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 18 | 0.85 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 21 | 0.85 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 21 | 0.85 |
| (1,669) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 18 | 0.85 |
| (1,550) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 5 | 0.85 |
| (1,550) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 18 | 0.85 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 10 | 0.85 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 10 | 0.85 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 31 | 0.85 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 31 | 0.85 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 20 | 0.85 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 15 | 0.85 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 15 | 0.85 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 15 | 0.85 |
| (1,150) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 9 | 0.85 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 25 | 0.85 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 39 | 0.84 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 14 | 0.84 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 14 | 0.84 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 18 | 0.84 |
| (2,692) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 31 | 0.84 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 20 | 0.84 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 20 | 0.84 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 20 | 0.84 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 22 | 0.84 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 22 | 0.84 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 22 | 0.84 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.84 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.84 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.84 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 13 | 0.84 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 13 | 0.84 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 20 | 0.84 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 20 | 0.84 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 38 | 0.84 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 38 | 0.84 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 39 | 0.84 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 39 | 0.84 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 1 | 0.84 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 1 | 0.84 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 40 | 0.84 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 40 | 0.84 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 43 | 0.84 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 43 | 0.84 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 13 | 0.84 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 13 | 0.84 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 20 | 0.84 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 20 | 0.84 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 38 | 0.84 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 38 | 0.84 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 39 | 0.84 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 39 | 0.84 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 1 | 0.84 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 1 | 0.84 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 40 | 0.84 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 40 | 0.84 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 43 | 0.84 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 43 | 0.84 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 14 | 0.84 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 14 | 0.84 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 18 | 0.84 |
| (2,191) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 31 | 0.84 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 39 | 0.84 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 39 | 0.84 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 14 | 0.84 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 14 | 0.84 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 18 | 0.84 |
| (1,669) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 31 | 0.84 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 13 | 0.84 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 13 | 0.84 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 20 | 0.84 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 20 | 0.84 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 38 | 0.84 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 38 | 0.84 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 39 | 0.84 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 39 | 0.84 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 1 | 0.84 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 1 | 0.84 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 40 | 0.84 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 40 | 0.84 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 43 | 0.84 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 43 | 0.84 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 12 | 0.84 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 18 | 0.84 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 35 | 0.84 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 43 | 0.84 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 50 | 0.84 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 48 | 0.84 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 48 | 0.84 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 48 | 0.84 |
| (1,167) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 31 | 0.84 |
| (1,167) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 31 | 0.84 |
| (1,167) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 31 | 0.84 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 19 | 0.83 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 23 | 0.83 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 29 | 0.83 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 33 | 0.83 |
| (2,692) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 28 | 0.83 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 6 | 0.83 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 6 | 0.83 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 6 | 0.83 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.83 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 16 | 0.83 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 16 | 0.83 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 19 | 0.83 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 19 | 0.83 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 48 | 0.83 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 48 | 0.83 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 16 | 0.83 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 16 | 0.83 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 19 | 0.83 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 19 | 0.83 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 48 | 0.83 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 48 | 0.83 |
| (2,191) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 28 | 0.83 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 19 | 0.83 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 23 | 0.83 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 29 | 0.83 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 33 | 0.83 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 19 | 0.83 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 23 | 0.83 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 29 | 0.83 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 33 | 0.83 |
| (1,669) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 28 | 0.83 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 16 | 0.83 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 16 | 0.83 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 19 | 0.83 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 19 | 0.83 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 48 | 0.83 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 48 | 0.83 |
| (1,432) | 1:A:26:MET:HB3 | 1:A:23:CYS:HA | 20 | 0.83 |
| (1,404) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 9 | 0.83 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 26 | 0.83 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 37 | 0.83 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 42 | 0.83 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 38 | 0.83 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.82 |
| (2,75) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 22 | 0.82 |
| (2,692) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 24 | 0.82 |
| (2,692) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 37 | 0.82 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 0.82 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 0.82 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 0.82 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.82 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 0.82 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 0.82 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 0.82 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 23 | 0.82 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 23 | 0.82 |
| (2,475) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 22 | 0.82 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 23 | 0.82 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 23 | 0.82 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.82 |
| (2,191) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 24 | 0.82 |
| (2,191) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 37 | 0.82 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.82 |
| (1,669) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 24 | 0.82 |
| (1,669) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 37 | 0.82 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 0.82 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 0.82 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 0.82 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 23 | 0.82 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 23 | 0.82 |
| (1,465) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 22 | 0.82 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 17 | 0.82 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 21 | 0.82 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 22 | 0.82 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 27 | 0.82 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 30 | 0.82 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 34 | 0.82 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 39 | 0.82 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 45 | 0.82 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 23 | 0.82 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 23 | 0.82 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 23 | 0.82 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 26 | 0.82 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 26 | 0.82 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 26 | 0.82 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 32 | 0.82 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 32 | 0.82 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 32 | 0.82 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 33 | 0.82 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 33 | 0.82 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 33 | 0.82 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 12 | 0.81 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 12 | 0.81 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,75) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 8 | 0.81 |
| (2,75) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 46 | 0.81 |
| (2,75) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 47 | 0.81 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.81 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 29 | 0.81 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 29 | 0.81 |
| (2,475) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 8 | 0.81 |
| (2,475) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 46 | 0.81 |
| (2,475) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 47 | 0.81 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 29 | 0.81 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 29 | 0.81 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 12 | 0.81 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 12 | 0.81 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 47 | 0.81 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 47 | 0.81 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 47 | 0.81 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 47 | 0.81 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 47 | 0.81 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 47 | 0.81 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 47 | 0.81 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 47 | 0.81 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 47 | 0.81 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 12 | 0.81 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 12 | 0.81 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 29 | 0.81 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 29 | 0.81 |
| (1,465) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 8 | 0.81 |
| (1,465) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 46 | 0.81 |
| (1,465) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 47 | 0.81 |
| (1,404) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 5 | 0.81 |
| (1,404) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 47 | 0.81 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 1 | 0.81 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 13 | 0.81 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 19 | 0.81 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 23 | 0.81 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 25 | 0.81 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 32 | 0.81 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 33 | 0.81 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 36 | 0.81 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 47 | 0.81 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 49 | 0.81 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 2 | 0.81 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 24 | 0.81 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 22 | 0.81 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 22 | 0.81 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 22 | 0.81 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:14:ASN:HB3 | 13 | 0.81 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:14:ASN:HB3 | 13 | 0.81 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:14:ASN:HB3 | 13 | 0.81 |
| (1,150) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 25 | 0.81 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 10 | 0.81 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 12 | 0.81 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 44 | 0.81 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 49 | 0.81 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 22 | 0.8 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 35 | 0.8 |
| (2,75) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 31 | 0.8 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 26 | 0.8 |
| (2,692) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 7 | 0.8 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 44 | 0.8 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 44 | 0.8 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 44 | 0.8 |
| (2,475) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 31 | 0.8 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 26 | 0.8 |
| (2,191) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 7 | 0.8 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 22 | 0.8 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 35 | 0.8 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 22 | 0.8 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 35 | 0.8 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 26 | 0.8 |
| (1,669) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 7 | 0.8 |
| (1,465) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 31 | 0.8 |
| (1,404) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 41 | 0.8 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 3 | 0.8 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 7 | 0.8 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 29 | 0.8 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 31 | 0.8 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 40 | 0.8 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 48 | 0.8 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 2 | 0.8 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 2 | 0.8 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 2 | 0.8 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 14 | 0.8 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 14 | 0.8 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 14 | 0.8 |
| (1,173) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 5 | 0.8 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 8 | 0.8 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 14 | 0.8 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 18 | 0.8 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 22 | 0.8 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 30 | 0.8 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 32 | 0.8 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 36 | 0.8 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 38 | 0.8 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 39 | 0.8 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 41 | 0.8 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 42 | 0.8 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 43 | 0.8 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 47 | 0.8 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 50 | 0.8 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 30 | 0.79 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 32 | 0.79 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 1 | 0.79 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 13 | 0.79 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 15 | 0.79 |
| (2,75) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 16 | 0.79 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 46 | 0.79 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 46 | 0.79 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 46 | 0.79 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.79 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.79 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 35 | 0.79 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 35 | 0.79 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 17 | 0.79 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 17 | 0.79 |
| (2,475) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 16 | 0.79 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 35 | 0.79 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 35 | 0.79 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 17 | 0.79 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 17 | 0.79 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 1 | 0.79 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 13 | 0.79 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 15 | 0.79 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 30 | 0.79 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 32 | 0.79 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 30 | 0.79 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 32 | 0.79 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 1 | 0.79 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 13 | 0.79 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 15 | 0.79 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 35 | 0.79 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 35 | 0.79 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 17 | 0.79 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 17 | 0.79 |
| (1,465) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 16 | 0.79 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 5 | 0.79 |
| (1,334) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 15 | 0.79 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 8 | 0.79 |
| (1,150) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 41 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 2 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 3 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 6 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 9 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 13 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 15 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 16 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 19 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 20 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 21 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 23 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 26 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 28 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 29 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 33 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 34 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 35 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 45 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 46 | 0.79 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 48 | 0.79 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 4 | 0.78 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 21 | 0.78 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 34 | 0.78 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 42 | 0.78 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 50 | 0.78 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 50 | 0.78 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 50 | 0.78 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.78 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.78 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,560) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 7 | 0.78 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 3 | 0.78 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 3 | 0.78 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 42 | 0.78 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 42 | 0.78 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 37 | 0.78 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 37 | 0.78 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 37 | 0.78 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 3 | 0.78 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 3 | 0.78 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 42 | 0.78 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 42 | 0.78 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 37 | 0.78 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 37 | 0.78 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 37 | 0.78 |
| (2,195) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 7 | 0.78 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 4 | 0.78 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 21 | 0.78 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 34 | 0.78 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 42 | 0.78 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 47 | 0.78 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 47 | 0.78 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 40 | 0.78 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 40 | 0.78 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 4 | 0.78 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 21 | 0.78 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 34 | 0.78 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 42 | 0.78 |
| (1,550) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 7 | 0.78 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 3 | 0.78 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 3 | 0.78 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 42 | 0.78 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 42 | 0.78 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 37 | 0.78 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 37 | 0.78 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 37 | 0.78 |
| (1,432) | 1:A:26:MET:HB3 | 1:A:23:CYS:HA | 44 | 0.78 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 44 | 0.78 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 44 | 0.78 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 44 | 0.78 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 37 | 0.78 |
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 37 | 0.78 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,164) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 37 | 0.78 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 1 | 0.78 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 4 | 0.78 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 5 | 0.78 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 11 | 0.78 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 17 | 0.78 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 31 | 0.78 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 15 | 0.78 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 15 | 0.78 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 15 | 0.78 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 15 | 0.78 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 15 | 0.78 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 15 | 0.78 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 27 | 0.78 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 27 | 0.78 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 27 | 0.78 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 27 | 0.78 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 27 | 0.78 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 27 | 0.78 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 50 | 0.77 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 50 | 0.77 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 46 | 0.77 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 47 | 0.77 |
| (2,75) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 4 | 0.77 |
| (2,75) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 20 | 0.77 |
| (2,75) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 28 | 0.77 |
| (2,75) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 30 | 0.77 |
| (2,582) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 9 | 0.77 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.77 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.77 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 45 | 0.77 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 45 | 0.77 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 2 | 0.77 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 2 | 0.77 |
| (2,475) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 4 | 0.77 |
| (2,475) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 20 | 0.77 |
| (2,475) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 28 | 0.77 |
| (2,475) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 30 | 0.77 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 45 | 0.77 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 45 | 0.77 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 2 | 0.77 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 2 | 0.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,315) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 9 | 0.77 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 50 | 0.77 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 50 | 0.77 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 46 | 0.77 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 47 | 0.77 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 21 | 0.77 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 21 | 0.77 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 46 | 0.77 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 46 | 0.77 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 50 | 0.77 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 50 | 0.77 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 46 | 0.77 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 47 | 0.77 |
| (1,566) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 9 | 0.77 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 45 | 0.77 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 45 | 0.77 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 2 | 0.77 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 2 | 0.77 |
| (1,465) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 4 | 0.77 |
| (1,465) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 20 | 0.77 |
| (1,465) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 28 | 0.77 |
| (1,465) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 30 | 0.77 |
| (1,189) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 37 | 0.77 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 24 | 0.77 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 27 | 0.77 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 37 | 0.77 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 40 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 1 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 1 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 1 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 1 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 1 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 1 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 2 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 2 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 2 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 2 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 2 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 2 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 3 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 3 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 3 | 0.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 3 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 3 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 3 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 5 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 5 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 5 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 5 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 5 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 5 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 6 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 6 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 6 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 6 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 6 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 6 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 9 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 9 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 9 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 9 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 9 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 9 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 10 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 10 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 10 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 10 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 10 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 10 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 11 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 11 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 11 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 11 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 11 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 11 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 13 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 13 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 13 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 13 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 13 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 13 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 19 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 19 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 19 | 0.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 19 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 19 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 19 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 22 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 22 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 22 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 22 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 22 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 22 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 24 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 24 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 24 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 24 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 24 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 24 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 26 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 26 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 26 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 26 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 26 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 26 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 28 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 28 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 28 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 28 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 28 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 28 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 31 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 31 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 31 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 31 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 31 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 31 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 33 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 33 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 33 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 33 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 33 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 33 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 37 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 37 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 37 | 0.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 37 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 37 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 37 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 38 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 38 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 38 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 38 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 38 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 38 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 40 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 40 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 40 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 40 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 40 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 40 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 42 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 42 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 42 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 42 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 42 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 42 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 43 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 43 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 43 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 43 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 43 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 43 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 44 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 44 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 44 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 44 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 44 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 44 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 47 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 47 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 47 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 47 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 47 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 47 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 50 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 50 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 50 | 0.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 50 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 50 | 0.77 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 50 | 0.77 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 44 | 0.76 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 4 | 0.76 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 4 | 0.76 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 24 | 0.76 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 2 | 0.76 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 45 | 0.76 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 50 | 0.76 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 33 | 0.76 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 38 | 0.76 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 38 | 0.76 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 38 | 0.76 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 36 | 0.76 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 36 | 0.76 |
| (2,519) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 0.76 |
| (2,519) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 0.76 |
| (2,519) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 0.76 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 36 | 0.76 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 36 | 0.76 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 33 | 0.76 |
| (2,417) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 0.76 |
| (2,417) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 0.76 |
| (2,417) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 0.76 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 4 | 0.76 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 4 | 0.76 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 24 | 0.76 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 2 | 0.76 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 45 | 0.76 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 50 | 0.76 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 44 | 0.76 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 30 | 0.76 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 30 | 0.76 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 26 | 0.76 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 26 | 0.76 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 29 | 0.76 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 29 | 0.76 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 29 | 0.76 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 29 | 0.76 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 29 | 0.76 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 29 | 0.76 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 29 | 0.76 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 29 | 0.76 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 29 | 0.76 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 44 | 0.76 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 4 | 0.76 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 4 | 0.76 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 24 | 0.76 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 2 | 0.76 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 45 | 0.76 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 50 | 0.76 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 33 | 0.76 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 36 | 0.76 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 36 | 0.76 |
| (1,509) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 0.76 |
| (1,509) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 0.76 |
| (1,509) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 0.76 |
| (1,404) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 30 | 0.76 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:14:ASN:HB3 | 28 | 0.76 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:14:ASN:HB3 | 28 | 0.76 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:14:ASN:HB3 | 28 | 0.76 |
| (1,173) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 31 | 0.76 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 50 | 0.76 |
| (1,12) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HB2 | 7 | 0.76 |
| (1,1013) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:2:SER:HB2 | 27 | 0.76 |
| (1,1013) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:2:SER:HB2 | 27 | 0.76 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 49 | 0.76 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 49 | 0.76 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 49 | 0.76 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 49 | 0.76 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 49 | 0.76 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 49 | 0.76 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 35 | 0.75 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 35 | 0.75 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 36 | 0.75 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 36 | 0.75 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 43 | 0.75 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 43 | 0.75 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 44 | 0.75 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 44 | 0.75 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 44 | 0.75 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 7 | 0.75 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 26 | 0.75 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 39 | 0.75 |
| (2,75) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 2 | 0.75 |
| (2,75) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 24 | 0.75 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 21 | 0.75 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 44 | 0.75 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 44 | 0.75 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 44 | 0.75 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 16 | 0.75 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 16 | 0.75 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 16 | 0.75 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 17 | 0.75 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 17 | 0.75 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 17 | 0.75 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 48 | 0.75 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 48 | 0.75 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 48 | 0.75 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.75 |
| (2,578) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.75 |
| (2,519) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 0.75 |
| (2,519) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 0.75 |
| (2,519) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 0.75 |
| (2,475) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 2 | 0.75 |
| (2,475) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 24 | 0.75 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 21 | 0.75 |
| (2,417) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 0.75 |
| (2,417) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 0.75 |
| (2,417) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 0.75 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 35 | 0.75 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 35 | 0.75 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 36 | 0.75 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 36 | 0.75 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 43 | 0.75 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 43 | 0.75 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 7 | 0.75 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 26 | 0.75 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 39 | 0.75 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 46 | 0.75 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 46 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 3 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 3 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 3 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 3 | 0.75 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 3 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 3 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 3 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 3 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 3 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 10 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 10 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 10 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 10 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 10 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 10 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 10 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 10 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 10 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 22 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 22 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 22 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 22 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 22 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 22 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 22 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 22 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 22 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 33 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 33 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 33 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 33 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 33 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 33 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 33 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 33 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 33 | 0.75 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 33 | 0.75 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 35 | 0.75 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 35 | 0.75 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 36 | 0.75 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 36 | 0.75 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 43 | 0.75 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 43 | 0.75 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 44 | 0.75 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 44 | 0.75 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 44 | 0.75 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 7 | 0.75 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 26 | 0.75 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 39 | 0.75 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 21 | 0.75 |
| (1,509) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 0.75 |
| (1,509) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 0.75 |
| (1,509) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 0.75 |
| (1,465) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 2 | 0.75 |
| (1,465) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 24 | 0.75 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 7 | 0.75 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 7 | 0.75 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 30 | 0.75 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 30 | 0.75 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 46 | 0.75 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 8 | 0.74 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 8 | 0.74 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 20 | 0.74 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 37 | 0.74 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 1 | 0.74 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 20 | 0.74 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 23 | 0.74 |
| (2,560) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 40 | 0.74 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 1 | 0.74 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 20 | 0.74 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 23 | 0.74 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 8 | 0.74 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 8 | 0.74 |
| (2,195) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 40 | 0.74 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 20 | 0.74 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 37 | 0.74 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 18 | 0.74 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 18 | 0.74 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 15 | 0.74 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 15 | 0.74 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 8 | 0.74 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 8 | 0.74 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 8 | 0.74 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 8 | 0.74 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 8 | 0.74 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 8 | 0.74 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 8 | 0.74 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 8 | 0.74 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 8 | 0.74 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 41 | 0.74 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 41 | 0.74 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 41 | 0.74 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 41 | 0.74 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 41 | 0.74 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 41 | 0.74 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 41 | 0.74 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 41 | 0.74 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 41 | 0.74 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 8 | 0.74 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 8 | 0.74 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 20 | 0.74 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 37 | 0.74 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 1 | 0.74 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 20 | 0.74 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 23 | 0.74 |
| (1,550) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:HB2 | 40 | 0.74 |
| (1,404) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 26 | 0.74 |
| (1,404) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 27 | 0.74 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 10 | 0.74 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 9 | 0.74 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 9 | 0.74 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 13 | 0.74 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 13 | 0.74 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 8 | 0.74 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 8 | 0.74 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 8 | 0.74 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 12 | 0.73 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 39 | 0.73 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 23 | 0.73 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 25 | 0.73 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 22 | 0.73 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 22 | 0.73 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 29 | 0.73 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 29 | 0.73 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 32 | 0.73 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 32 | 0.73 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 28 | 0.73 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.73 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.73 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.73 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.73 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.73 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 27 | 0.73 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 38 | 0.73 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 48 | 0.73 |
| (2,75) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 7 | 0.73 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 24 | 0.73 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.73 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.73 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.73 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.73 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.73 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.73 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG21 | 1:A:12:GLN:HE22 | 31 | 0.73 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG22 | 1:A:12:GLN:HE22 | 31 | 0.73 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG23 | 1:A:12:GLN:HE22 | 31 | 0.73 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 28 | 0.73 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 28 | 0.73 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 28 | 0.73 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 32 | 0.73 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 32 | 0.73 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 32 | 0.73 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 37 | 0.73 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 37 | 0.73 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 37 | 0.73 |
| (2,629) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 32 | 0.73 |
| (2,629) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 32 | 0.73 |
| (2,629) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 32 | 0.73 |
| (2,475) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 7 | 0.73 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 12 | 0.73 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 39 | 0.73 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 24 | 0.73 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 23 | 0.73 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 25 | 0.73 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 22 | 0.73 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 22 | 0.73 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 29 | 0.73 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 29 | 0.73 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 32 | 0.73 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 32 | 0.73 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 28 | 0.73 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 27 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 38 | 0.73 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 48 | 0.73 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 10 | 0.73 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 10 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 1 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 1 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 1 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 1 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 1 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 1 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 1 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 1 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 1 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 5 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 5 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 5 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 5 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 5 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 5 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 5 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 5 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 5 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 6 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 6 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 6 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 6 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 6 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 6 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 6 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 6 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 6 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 7 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 7 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 7 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 7 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 7 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 7 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 7 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 7 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 7 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 11 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 11 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 11 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 11 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 11 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 11 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 11 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 11 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 11 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 12 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 12 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 12 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 12 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 12 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 12 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 12 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 12 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 12 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 21 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 21 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 21 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 21 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 21 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 21 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 21 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 21 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 21 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 24 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 24 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 24 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 24 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 24 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 24 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 24 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 24 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 24 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 25 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 25 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 25 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 25 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 25 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 25 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 25 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 25 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 25 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 28 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 28 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 28 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 28 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 28 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 28 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 28 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 28 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 28 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 31 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 31 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 31 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 31 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 31 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 31 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 31 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 31 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 31 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 38 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 38 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 38 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 38 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 38 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 38 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 38 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 38 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 38 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 39 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 39 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 39 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 39 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 39 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 39 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 39 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 39 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 39 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 40 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 40 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 40 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 40 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 40 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 40 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 40 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 40 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 40 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 43 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 43 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 43 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 43 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 43 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 43 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 43 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 43 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 43 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 46 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 46 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 46 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 46 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 46 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 46 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 46 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 46 | 0.73 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 46 | 0.73 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 12 | 0.73 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 39 | 0.73 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 23 | 0.73 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 25 | 0.73 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 22 | 0.73 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 22 | 0.73 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 29 | 0.73 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 29 | 0.73 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 32 | 0.73 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 32 | 0.73 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 28 | 0.73 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.73 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.73 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.73 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.73 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.73 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.73 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 27 | 0.73 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 38 | 0.73 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 48 | 0.73 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 24 | 0.73 |
| (1,465) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 7 | 0.73 |
| (1,404) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 25 | 0.73 |
| (1,404) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 35 | 0.73 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 11 | 0.73 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 11 | 0.73 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 11 | 0.73 |
| (1,173) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 7 | 0.73 |
| (1,173) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 23 | 0.73 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 19 | 0.73 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 19 | 0.73 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 42 | 0.73 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 42 | 0.73 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 47 | 0.73 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 47 | 0.73 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 47 | 0.73 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 47 | 0.73 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 47 | 0.73 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 47 | 0.73 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 25 | 0.72 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 30 | 0.72 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 16 | 0.72 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 16 | 0.72 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 42 | 0.72 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 42 | 0.72 |
| (2,802) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 32 | 0.72 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 10 | 0.72 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 16 | 0.72 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 30 | 0.72 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 9 | 0.72 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 9 | 0.72 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 9 | 0.72 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 25 | 0.72 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 30 | 0.72 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 16 | 0.72 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 30 | 0.72 |
| (2,359) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 32 | 0.72 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 16 | 0.72 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 16 | 0.72 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 42 | 0.72 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 42 | 0.72 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 10 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 16 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 16 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 16 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 16 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 16 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 16 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 16 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 16 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 16 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 34 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 34 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 34 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 34 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 34 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 34 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 34 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 34 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 34 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 36 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 36 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 36 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 36 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 36 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 36 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 36 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 36 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 36 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 44 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 44 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 44 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 44 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 44 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 44 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 44 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 44 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 44 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 48 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 48 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 48 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 48 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 48 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 48 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 48 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 48 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 48 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 49 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 49 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 49 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 49 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 49 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 49 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 49 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 49 | 0.72 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 49 | 0.72 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 25 | 0.72 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 30 | 0.72 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 16 | 0.72 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 16 | 0.72 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 42 | 0.72 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 42 | 0.72 |
| (1,777) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 32 | 0.72 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 10 | 0.72 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 16 | 0.72 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 30 | 0.72 |
| (1,404) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 17 | 0.72 |
| (1,404) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 50 | 0.72 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 23 | 0.72 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 23 | 0.72 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 4 | 0.72 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 12 | 0.72 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 25 | 0.72 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 25 | 0.72 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 50 | 0.72 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 50 | 0.72 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 37 | 0.71 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 7 | 0.71 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 14 | 0.71 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 16 | 0.71 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 20 | 0.71 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 7 | 0.71 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.71 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.71 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.71 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.71 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.71 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 6 | 0.71 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 9 | 0.71 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 24 | 0.71 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 41 | 0.71 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 43 | 0.71 |
| (2,75) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 49 | 0.71 |
| (2,75) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 50 | 0.71 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 7 | 0.71 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 17 | 0.71 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 19 | 0.71 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.71 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.71 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.71 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.71 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.71 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.71 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 10 | 0.71 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 10 | 0.71 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 10 | 0.71 |
| (2,519) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 0.71 |
| (2,519) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 0.71 |
| (2,519) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 0.71 |
| (2,519) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 0.71 |
| (2,519) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 0.71 |
| (2,519) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 0.71 |
| (2,475) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 49 | 0.71 |
| (2,475) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 50 | 0.71 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 7 | 0.71 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 14 | 0.71 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 16 | 0.71 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 7 | 0.71 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 17 | 0.71 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 19 | 0.71 |
| (2,417) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 0.71 |
| (2,417) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 0.71 |
| (2,417) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 0.71 |
| (2,417) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 0.71 |
| (2,417) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 0.71 |
| (2,417) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 0.71 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 20 | 0.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 7 | 0.71 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 6 | 0.71 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 9 | 0.71 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 24 | 0.71 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 41 | 0.71 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 43 | 0.71 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 37 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 17 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 17 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 17 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 17 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 17 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 17 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 17 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 17 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 17 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 30 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 30 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 30 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 30 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 30 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 30 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 30 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 30 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 30 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 35 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 35 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 35 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 35 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 35 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 35 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 35 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 35 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 35 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 50 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 50 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 50 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 50 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 50 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 50 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 50 | 0.71 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 50 | 0.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 50 | 0.71 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 37 | 0.71 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 7 | 0.71 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 14 | 0.71 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 16 | 0.71 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 20 | 0.71 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 7 | 0.71 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.71 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.71 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.71 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.71 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.71 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.71 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 6 | 0.71 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 9 | 0.71 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 24 | 0.71 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 41 | 0.71 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 43 | 0.71 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 7 | 0.71 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 17 | 0.71 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 19 | 0.71 |
| (1,509) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 0.71 |
| (1,509) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 0.71 |
| (1,509) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 0.71 |
| (1,509) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 0.71 |
| (1,509) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 0.71 |
| (1,509) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 0.71 |
| (1,465) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 49 | 0.71 |
| (1,465) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 50 | 0.71 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 18 | 0.71 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 18 | 0.71 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 18 | 0.71 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:14:ASN:HB3 | 5 | 0.71 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:14:ASN:HB3 | 5 | 0.71 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:14:ASN:HB3 | 5 | 0.71 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:14:ASN:HB3 | 31 | 0.71 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:14:ASN:HB3 | 31 | 0.71 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:14:ASN:HB3 | 31 | 0.71 |
| (1,167) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 27 | 0.71 |
| (1,167) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 27 | 0.71 |
| (1,167) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 27 | 0.71 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 8 | 0.71 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 8 | 0.71 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 23 | 0.71 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 23 | 0.71 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 24 | 0.71 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 24 | 0.71 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 26 | 0.71 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 26 | 0.71 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 18 | 0.7 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 23 | 0.7 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 1 | 0.7 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 8 | 0.7 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 15 | 0.7 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 38 | 0.7 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 21 | 0.7 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 21 | 0.7 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 33 | 0.7 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 33 | 0.7 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 39 | 0.7 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 39 | 0.7 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 41 | 0.7 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 41 | 0.7 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 44 | 0.7 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 44 | 0.7 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 23 | 0.7 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 27 | 0.7 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 27 | 0.7 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 27 | 0.7 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.7 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.7 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.7 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 17 | 0.7 |
| (2,75) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 18 | 0.7 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 41 | 0.7 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 45 | 0.7 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 50 | 0.7 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 27 | 0.7 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 27 | 0.7 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 27 | 0.7 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.7 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.7 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.7 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 43 | 0.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 43 | 0.7 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 43 | 0.7 |
| (2,475) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 18 | 0.7 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 18 | 0.7 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 23 | 0.7 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 41 | 0.7 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 45 | 0.7 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 50 | 0.7 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 1 | 0.7 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 8 | 0.7 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 15 | 0.7 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 38 | 0.7 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 21 | 0.7 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 21 | 0.7 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 33 | 0.7 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 33 | 0.7 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 39 | 0.7 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 39 | 0.7 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 41 | 0.7 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 41 | 0.7 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 44 | 0.7 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 44 | 0.7 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 23 | 0.7 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 17 | 0.7 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 8 | 0.7 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 8 | 0.7 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 50 | 0.7 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 50 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 9 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 9 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 9 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 9 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 9 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 9 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 9 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 9 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 9 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 13 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 13 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 13 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 13 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 13 | 0.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 13 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 13 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 13 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 13 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 14 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 14 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 14 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 14 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 14 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 14 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 14 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 14 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 14 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 15 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 15 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 15 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 15 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 15 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 15 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 15 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 15 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 15 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 20 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 20 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 20 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 20 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 20 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 20 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 20 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 20 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 20 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 26 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 26 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 26 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 26 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 26 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 26 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 26 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 26 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 26 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 27 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 27 | 0.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 27 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 27 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 27 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 27 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 27 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 27 | 0.7 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 27 | 0.7 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 7 | 0.7 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 7 | 0.7 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 18 | 0.7 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 23 | 0.7 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 1 | 0.7 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 8 | 0.7 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 15 | 0.7 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 38 | 0.7 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 21 | 0.7 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 21 | 0.7 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 33 | 0.7 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 33 | 0.7 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 39 | 0.7 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 39 | 0.7 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 41 | 0.7 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 41 | 0.7 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 44 | 0.7 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 44 | 0.7 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 23 | 0.7 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 27 | 0.7 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 27 | 0.7 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 27 | 0.7 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.7 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.7 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.7 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 17 | 0.7 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 41 | 0.7 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 45 | 0.7 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 50 | 0.7 |
| (1,465) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 18 | 0.7 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 2 | 0.7 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 3 | 0.7 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 6 | 0.7 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 12 | 0.7 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 30 | 0.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 42 | 0.7 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 47 | 0.7 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 48 | 0.7 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 6 | 0.7 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 45 | 0.7 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 45 | 0.7 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 45 | 0.7 |
| (1,160) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:27:CYS:HB3 | 31 | 0.7 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 1 | 0.7 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 1 | 0.7 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 12 | 0.7 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 12 | 0.7 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 20 | 0.7 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 20 | 0.7 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 31 | 0.7 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 31 | 0.7 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 32 | 0.7 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 32 | 0.7 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 8 | 0.7 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 8 | 0.7 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 8 | 0.7 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 8 | 0.7 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 8 | 0.7 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 8 | 0.7 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 36 | 0.7 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 36 | 0.7 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 36 | 0.7 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 36 | 0.7 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 36 | 0.7 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 36 | 0.7 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 10 | 0.69 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 19 | 0.69 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 45 | 0.69 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 30 | 0.69 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 46 | 0.69 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 48 | 0.69 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.69 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.69 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.69 |
| (2,802) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 12 | 0.69 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 22 | 0.69 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 35 | 0.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.69 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.69 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.69 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 37 | 0.69 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 37 | 0.69 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 37 | 0.69 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 10 | 0.69 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 19 | 0.69 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 45 | 0.69 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 22 | 0.69 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 35 | 0.69 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 37 | 0.69 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 37 | 0.69 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 37 | 0.69 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 30 | 0.69 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 46 | 0.69 |
| (2,359) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 12 | 0.69 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 48 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 19 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 19 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 19 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 19 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 19 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 19 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 19 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 19 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 19 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 23 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 23 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 23 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 23 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 23 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 23 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 23 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 23 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 23 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 37 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 37 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 37 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 37 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 37 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 37 | 0.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 37 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 37 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 37 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 42 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 42 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 42 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 42 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 42 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 42 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 42 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 42 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 42 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 45 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 45 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 45 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 45 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 45 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 45 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 45 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 45 | 0.69 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 45 | 0.69 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 10 | 0.69 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 19 | 0.69 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 45 | 0.69 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 30 | 0.69 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 46 | 0.69 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 48 | 0.69 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.69 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.69 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.69 |
| (1,777) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 12 | 0.69 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 22 | 0.69 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 35 | 0.69 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 37 | 0.69 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 37 | 0.69 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 37 | 0.69 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 10 | 0.69 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 15 | 0.69 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 20 | 0.69 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 21 | 0.69 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 24 | 0.69 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 25 | 0.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 27 | 0.69 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 32 | 0.69 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 34 | 0.69 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 36 | 0.69 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 37 | 0.69 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 38 | 0.69 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 43 | 0.69 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 50 | 0.69 |
| (1,160) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:27:CYS:HB3 | 10 | 0.69 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 3 | 0.69 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 3 | 0.69 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 10 | 0.69 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 10 | 0.69 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 28 | 0.69 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 28 | 0.69 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 17 | 0.69 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 17 | 0.69 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 17 | 0.69 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 17 | 0.69 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 17 | 0.69 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 17 | 0.69 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 15 | 0.68 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 22 | 0.68 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 47 | 0.68 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 29 | 0.68 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 2 | 0.68 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 2 | 0.68 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 10 | 0.68 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 10 | 0.68 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 20 | 0.68 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 20 | 0.68 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 38 | 0.68 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 38 | 0.68 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 45 | 0.68 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 45 | 0.68 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 47 | 0.68 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 47 | 0.68 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 2 | 0.68 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 2 | 0.68 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 2 | 0.68 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 31 | 0.68 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 31 | 0.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 31 | 0.68 |
| (2,802) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 7 | 0.68 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 25 | 0.68 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 28 | 0.68 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 2 | 0.68 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 2 | 0.68 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 2 | 0.68 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 31 | 0.68 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 31 | 0.68 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 31 | 0.68 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 8 | 0.68 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 8 | 0.68 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 8 | 0.68 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 15 | 0.68 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 22 | 0.68 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 47 | 0.68 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 28 | 0.68 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 29 | 0.68 |
| (2,359) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 7 | 0.68 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 2 | 0.68 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 2 | 0.68 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 10 | 0.68 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 10 | 0.68 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 20 | 0.68 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 20 | 0.68 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 38 | 0.68 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 38 | 0.68 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 45 | 0.68 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 45 | 0.68 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 47 | 0.68 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 47 | 0.68 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 25 | 0.68 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 4 | 0.68 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 4 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 2 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 2 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 2 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 2 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 2 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 2 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 2 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 2 | 0.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 2 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 4 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 4 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 4 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 4 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 4 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 4 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 4 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 4 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 4 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 18 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 18 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 18 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 18 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 18 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 18 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 18 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 18 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 18 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 32 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 32 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 32 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 32 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 32 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 32 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 32 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 32 | 0.68 |
| (1,990) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 32 | 0.68 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 15 | 0.68 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 22 | 0.68 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 47 | 0.68 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 29 | 0.68 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 2 | 0.68 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 2 | 0.68 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 10 | 0.68 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 10 | 0.68 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 20 | 0.68 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 20 | 0.68 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 38 | 0.68 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 38 | 0.68 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 45 | 0.68 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 45 | 0.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 47 | 0.68 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 47 | 0.68 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 2 | 0.68 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 2 | 0.68 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 2 | 0.68 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 31 | 0.68 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 31 | 0.68 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 31 | 0.68 |
| (1,777) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 7 | 0.68 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 25 | 0.68 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 28 | 0.68 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 1 | 0.68 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 7 | 0.68 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 19 | 0.68 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 39 | 0.68 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 13 | 0.68 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 13 | 0.68 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 13 | 0.68 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 31 | 0.68 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 31 | 0.68 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 31 | 0.68 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 37 | 0.68 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 37 | 0.68 |
| (1,165) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 37 | 0.68 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 7 | 0.68 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 7 | 0.68 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 30 | 0.68 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 30 | 0.68 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 33 | 0.68 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 33 | 0.68 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 35 | 0.68 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 35 | 0.68 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 37 | 0.68 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 37 | 0.68 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 41 | 0.68 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 41 | 0.68 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 12 | 0.68 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 12 | 0.68 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 12 | 0.68 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 12 | 0.68 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 12 | 0.68 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 12 | 0.68 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 45 | 0.68 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 45 | 0.68 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 45 | 0.68 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 45 | 0.68 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 45 | 0.68 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 45 | 0.68 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 34 | 0.67 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 24 | 0.67 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 29 | 0.67 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 41 | 0.67 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 6 | 0.67 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 21 | 0.67 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 2 | 0.67 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 44 | 0.67 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 34 | 0.67 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 0.67 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 0.67 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 0.67 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 0.67 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 0.67 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 0.67 |
| (2,519) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 0.67 |
| (2,519) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 0.67 |
| (2,519) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 0.67 |
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 30 | 0.67 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 24 | 0.67 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 29 | 0.67 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 41 | 0.67 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 34 | 0.67 |
| (2,417) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 0.67 |
| (2,417) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 0.67 |
| (2,417) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 0.67 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 6 | 0.67 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 21 | 0.67 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 30 | 0.67 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 2 | 0.67 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 44 | 0.67 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 34 | 0.67 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 24 | 0.67 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 24 | 0.67 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 34 | 0.67 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 24 | 0.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 29 | 0.67 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 41 | 0.67 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 6 | 0.67 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 21 | 0.67 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 2 | 0.67 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 44 | 0.67 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 34 | 0.67 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 0.67 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 0.67 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 0.67 |
| (1,509) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 0.67 |
| (1,509) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 0.67 |
| (1,509) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 0.67 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 30 | 0.67 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 44 | 0.67 |
| (1,233) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HB3 | 44 | 0.67 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 5 | 0.67 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 5 | 0.67 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 5 | 0.67 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 43 | 0.67 |
| (1,154) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:20:PHE:HA | 33 | 0.67 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 13 | 0.67 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 13 | 0.67 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 18 | 0.67 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 18 | 0.67 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 27 | 0.67 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 27 | 0.67 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 47 | 0.67 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 47 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 14 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 14 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 14 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 14 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 14 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 14 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 16 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 16 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 16 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 16 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 16 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 16 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 23 | 0.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 23 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 23 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 23 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 23 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 23 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 29 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 29 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 29 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 29 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 29 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 29 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 30 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 30 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 30 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 30 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 30 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 30 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 35 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 35 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 35 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 35 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 35 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 35 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 39 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 39 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 39 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 39 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 39 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 39 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 41 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 41 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 41 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 41 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 41 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 41 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 48 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 48 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 48 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 48 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 48 | 0.67 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 48 | 0.67 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 18 | 0.66 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 28 | 0.66 |
| (2,857) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HA | 8 | 0.66 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 2 | 0.66 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 9 | 0.66 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 9 | 0.66 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 15 | 0.66 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 15 | 0.66 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 25 | 0.66 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 25 | 0.66 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 34 | 0.66 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 34 | 0.66 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 49 | 0.66 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 49 | 0.66 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 38 | 0.66 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 50 | 0.66 |
| (2,75) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 9 | 0.66 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 8 | 0.66 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 15 | 0.66 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 25 | 0.66 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 32 | 0.66 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 36 | 0.66 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.66 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.66 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.66 |
| (2,509) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE1 | 20 | 0.66 |
| (2,509) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE2 | 20 | 0.66 |
| (2,509) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE3 | 20 | 0.66 |
| (2,509) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE1 | 44 | 0.66 |
| (2,509) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE2 | 44 | 0.66 |
| (2,509) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE3 | 44 | 0.66 |
| (2,475) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 9 | 0.66 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 28 | 0.66 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.66 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.66 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.66 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 8 | 0.66 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 15 | 0.66 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 25 | 0.66 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 32 | 0.66 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 36 | 0.66 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 2 | 0.66 |
| (2,371) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HA | 8 | 0.66 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,363) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE1 | 20 | 0.66 |
| (2,363) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE2 | 20 | 0.66 |
| (2,363) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE3 | 20 | 0.66 |
| (2,363) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE1 | 44 | 0.66 |
| (2,363) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE2 | 44 | 0.66 |
| (2,363) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE3 | 44 | 0.66 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 38 | 0.66 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 50 | 0.66 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 9 | 0.66 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 9 | 0.66 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 15 | 0.66 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 15 | 0.66 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 25 | 0.66 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 25 | 0.66 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 34 | 0.66 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 34 | 0.66 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 49 | 0.66 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 49 | 0.66 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 18 | 0.66 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 33 | 0.66 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 33 | 0.66 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 18 | 0.66 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 28 | 0.66 |
| (1,831) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HA | 8 | 0.66 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 2 | 0.66 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 9 | 0.66 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 9 | 0.66 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 15 | 0.66 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 15 | 0.66 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 25 | 0.66 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 25 | 0.66 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 34 | 0.66 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 34 | 0.66 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 49 | 0.66 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 49 | 0.66 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 38 | 0.66 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 50 | 0.66 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 8 | 0.66 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 15 | 0.66 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 25 | 0.66 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 32 | 0.66 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 36 | 0.66 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.66 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.66 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.66 |
| (1,499) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE1 | 20 | 0.66 |
| (1,499) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE2 | 20 | 0.66 |
| (1,499) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE3 | 20 | 0.66 |
| (1,499) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE1 | 44 | 0.66 |
| (1,499) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE2 | 44 | 0.66 |
| (1,499) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE3 | 44 | 0.66 |
| (1,465) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HE2 | 9 | 0.66 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 17 | 0.66 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 17 | 0.66 |
| (1,258) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 31 | 0.66 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 11 | 0.66 |
| (1,233) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HB3 | 20 | 0.66 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 13 | 0.66 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 13 | 0.66 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 13 | 0.66 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:14:ASN:HB3 | 38 | 0.66 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:14:ASN:HB3 | 38 | 0.66 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:14:ASN:HB3 | 38 | 0.66 |
| (1,173) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 18 | 0.66 |
| (1,173) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 28 | 0.66 |
| (1,173) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 40 | 0.66 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 10 | 0.66 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 17 | 0.66 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 17 | 0.66 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 19 | 0.66 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 19 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 7 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 7 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 7 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 7 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 7 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 7 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 18 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 18 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 18 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 18 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 18 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 18 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 20 | 0.66 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 20 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 20 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 20 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 20 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 20 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 25 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 25 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 25 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 25 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 25 | 0.66 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 25 | 0.66 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 5 | 0.65 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 32 | 0.65 |
| (2,857) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HA | 20 | 0.65 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 7 | 0.65 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 14 | 0.65 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 42 | 0.65 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 45 | 0.65 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 25 | 0.65 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 5 | 0.65 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 45 | 0.65 |
| (2,802) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 2 | 0.65 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 47 | 0.65 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 48 | 0.65 |
| (2,509) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE1 | 43 | 0.65 |
| (2,509) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE2 | 43 | 0.65 |
| (2,509) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE3 | 43 | 0.65 |
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 37 | 0.65 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 5 | 0.65 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 32 | 0.65 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 48 | 0.65 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 7 | 0.65 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 14 | 0.65 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 42 | 0.65 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 45 | 0.65 |
| (2,371) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HA | 20 | 0.65 |
| (2,363) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE1 | 43 | 0.65 |
| (2,363) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE2 | 43 | 0.65 |
| (2,363) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE3 | 43 | 0.65 |
| (2,359) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 2 | 0.65 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 47 | 0.65 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 37 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 25 | 0.65 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 5 | 0.65 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 45 | 0.65 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 12 | 0.65 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 12 | 0.65 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 5 | 0.65 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 32 | 0.65 |
| (1,831) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HA | 20 | 0.65 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 7 | 0.65 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 14 | 0.65 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 42 | 0.65 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 45 | 0.65 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 25 | 0.65 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 5 | 0.65 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 45 | 0.65 |
| (1,777) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 2 | 0.65 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 47 | 0.65 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 48 | 0.65 |
| (1,499) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE1 | 43 | 0.65 |
| (1,499) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE2 | 43 | 0.65 |
| (1,499) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE3 | 43 | 0.65 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 37 | 0.65 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 46 | 0.65 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 46 | 0.65 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 16 | 0.65 |
| (1,173) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 3 | 0.65 |
| (1,173) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 24 | 0.65 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 30 | 0.65 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 50 | 0.65 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 30 | 0.65 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 26 | 0.65 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 26 | 0.65 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 37 | 0.65 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 37 | 0.65 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 38 | 0.65 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 38 | 0.65 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 47 | 0.65 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 47 | 0.65 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 47 | 0.65 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 47 | 0.65 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 4 | 0.65 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 4 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 4 | 0.65 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 4 | 0.65 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 4 | 0.65 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 4 | 0.65 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 4 | 0.64 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 35 | 0.64 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 49 | 0.64 |
| (2,857) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HA | 44 | 0.64 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 26 | 0.64 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 28 | 0.64 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 49 | 0.64 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 17 | 0.64 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 17 | 0.64 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 19 | 0.64 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 19 | 0.64 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 26 | 0.64 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 26 | 0.64 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 30 | 0.64 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 30 | 0.64 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 13 | 0.64 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 14 | 0.64 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 18 | 0.64 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 27 | 0.64 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 30 | 0.64 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 31 | 0.64 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 35 | 0.64 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 43 | 0.64 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 46 | 0.64 |
| (2,814) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 29 | 0.64 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 2 | 0.64 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 38 | 0.64 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 46 | 0.64 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 10 | 0.64 |
| (2,509) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE1 | 8 | 0.64 |
| (2,509) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE2 | 8 | 0.64 |
| (2,509) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE3 | 8 | 0.64 |
| (2,462) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 29 | 0.64 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 4 | 0.64 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 35 | 0.64 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 49 | 0.64 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 2 | 0.64 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 38 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 46 | 0.64 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 10 | 0.64 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 26 | 0.64 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 28 | 0.64 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 49 | 0.64 |
| (2,371) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HA | 44 | 0.64 |
| (2,363) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE1 | 8 | 0.64 |
| (2,363) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE2 | 8 | 0.64 |
| (2,363) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE3 | 8 | 0.64 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 17 | 0.64 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 17 | 0.64 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 19 | 0.64 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 19 | 0.64 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 26 | 0.64 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 26 | 0.64 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 30 | 0.64 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 30 | 0.64 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 13 | 0.64 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 14 | 0.64 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 18 | 0.64 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 27 | 0.64 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 30 | 0.64 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 31 | 0.64 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 35 | 0.64 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 43 | 0.64 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 46 | 0.64 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 32 | 0.64 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 32 | 0.64 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 4 | 0.64 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 35 | 0.64 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 49 | 0.64 |
| (1,831) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HA | 44 | 0.64 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 26 | 0.64 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 28 | 0.64 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 49 | 0.64 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 17 | 0.64 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 17 | 0.64 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 19 | 0.64 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 19 | 0.64 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 26 | 0.64 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 26 | 0.64 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 30 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 30 | 0.64 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 13 | 0.64 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 14 | 0.64 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 18 | 0.64 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 27 | 0.64 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 30 | 0.64 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 31 | 0.64 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 35 | 0.64 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 43 | 0.64 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 46 | 0.64 |
| (1,789) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 29 | 0.64 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 2 | 0.64 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 38 | 0.64 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 46 | 0.64 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 10 | 0.64 |
| (1,499) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE1 | 8 | 0.64 |
| (1,499) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE2 | 8 | 0.64 |
| (1,499) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HE3 | 8 | 0.64 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 2 | 0.64 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 2 | 0.64 |
| (1,233) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HB3 | 8 | 0.64 |
| (1,233) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HB3 | 43 | 0.64 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 47 | 0.64 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 47 | 0.64 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 47 | 0.64 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 39 | 0.64 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 47 | 0.64 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 21 | 0.64 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 21 | 0.64 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 21 | 0.64 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 21 | 0.64 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 21 | 0.64 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 21 | 0.64 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 34 | 0.64 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 34 | 0.64 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 34 | 0.64 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 34 | 0.64 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 34 | 0.64 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 34 | 0.64 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 37 | 0.63 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 42 | 0.63 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 4 | 0.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 9 | 0.63 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 16 | 0.63 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 33 | 0.63 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 34 | 0.63 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 40 | 0.63 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 13 | 0.63 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 2 | 0.63 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 7 | 0.63 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 9 | 0.63 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 25 | 0.63 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 26 | 0.63 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 48 | 0.63 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 12 | 0.63 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 18 | 0.63 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 43 | 0.63 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 50 | 0.63 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 6 | 0.63 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 3 | 0.63 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 9 | 0.63 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 44 | 0.63 |
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 31 | 0.63 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 37 | 0.63 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 42 | 0.63 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 6 | 0.63 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 3 | 0.63 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 9 | 0.63 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 44 | 0.63 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 4 | 0.63 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 9 | 0.63 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 16 | 0.63 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 33 | 0.63 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 34 | 0.63 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 40 | 0.63 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 12 | 0.63 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 18 | 0.63 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 43 | 0.63 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 50 | 0.63 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 31 | 0.63 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 13 | 0.63 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 2 | 0.63 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 7 | 0.63 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 9 | 0.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 25 | 0.63 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 26 | 0.63 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 48 | 0.63 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 37 | 0.63 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 37 | 0.63 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 37 | 0.63 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 42 | 0.63 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 4 | 0.63 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 9 | 0.63 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 16 | 0.63 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 33 | 0.63 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 34 | 0.63 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 40 | 0.63 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 13 | 0.63 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 2 | 0.63 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 7 | 0.63 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 9 | 0.63 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 25 | 0.63 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 26 | 0.63 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 48 | 0.63 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 12 | 0.63 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 18 | 0.63 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 43 | 0.63 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 50 | 0.63 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 6 | 0.63 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 3 | 0.63 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 9 | 0.63 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 44 | 0.63 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 31 | 0.63 |
| (1,255) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:7:LYS:HB3 | 20 | 0.63 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 32 | 0.63 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 32 | 0.63 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 32 | 0.63 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 32 | 0.63 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 32 | 0.63 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 32 | 0.63 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 46 | 0.63 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 46 | 0.63 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB2 | 46 | 0.63 |
| (1,1002) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 46 | 0.63 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG2 | 46 | 0.63 |
| (1,1002) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HG3 | 46 | 0.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 3 | 0.62 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 38 | 0.62 |
| (2,857) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HA | 43 | 0.62 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 19 | 0.62 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 50 | 0.62 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 48 | 0.62 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 48 | 0.62 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 22 | 0.62 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.62 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.62 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.62 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.62 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.62 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.62 |
| (2,825) | 1:A:4:GLN:HA | 1:A:7:LYS:HB2 | 20 | 0.62 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 1 | 0.62 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 6 | 0.62 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 8 | 0.62 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 16 | 0.62 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 17 | 0.62 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 20 | 0.62 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 39 | 0.62 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 41 | 0.62 |
| (2,808) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE1 | 43 | 0.62 |
| (2,808) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE2 | 43 | 0.62 |
| (2,808) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE3 | 43 | 0.62 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 30 | 0.62 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.62 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.62 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.62 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.62 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.62 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.62 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 30 | 0.62 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 30 | 0.62 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 30 | 0.62 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 11 | 0.62 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 14 | 0.62 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 29 | 0.62 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 40 | 0.62 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 47 | 0.62 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 5 | 0.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 5 | 0.62 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 5 | 0.62 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 39 | 0.62 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 39 | 0.62 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 39 | 0.62 |
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 1 | 0.62 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 38 | 0.62 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 11 | 0.62 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 14 | 0.62 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 29 | 0.62 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 40 | 0.62 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 47 | 0.62 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 5 | 0.62 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 5 | 0.62 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 5 | 0.62 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 39 | 0.62 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 39 | 0.62 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 39 | 0.62 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 19 | 0.62 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 50 | 0.62 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 30 | 0.62 |
| (2,371) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HA | 43 | 0.62 |
| (2,370) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE1 | 43 | 0.62 |
| (2,370) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE2 | 43 | 0.62 |
| (2,370) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE3 | 43 | 0.62 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 1 | 0.62 |
| (2,35) | 1:A:4:GLN:HA | 1:A:7:LYS:HB2 | 20 | 0.62 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 48 | 0.62 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 48 | 0.62 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 22 | 0.62 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 1 | 0.62 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 6 | 0.62 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 8 | 0.62 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 16 | 0.62 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 17 | 0.62 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 20 | 0.62 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 39 | 0.62 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 41 | 0.62 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 3 | 0.62 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 3 | 0.62 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 38 | 0.62 |
| (1,831) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HA | 43 | 0.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 19 | 0.62 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 50 | 0.62 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 48 | 0.62 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 48 | 0.62 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 22 | 0.62 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.62 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.62 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.62 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.62 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.62 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.62 |
| (1,799) | 1:A:4:GLN:HA | 1:A:7:LYS:HB2 | 20 | 0.62 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 1 | 0.62 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 6 | 0.62 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 8 | 0.62 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 16 | 0.62 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 17 | 0.62 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 20 | 0.62 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 39 | 0.62 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 41 | 0.62 |
| (1,783) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE1 | 43 | 0.62 |
| (1,783) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE2 | 43 | 0.62 |
| (1,783) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE3 | 43 | 0.62 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 30 | 0.62 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 11 | 0.62 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 14 | 0.62 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 29 | 0.62 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 40 | 0.62 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 47 | 0.62 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 5 | 0.62 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 5 | 0.62 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 5 | 0.62 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 39 | 0.62 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 39 | 0.62 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 39 | 0.62 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 1 | 0.62 |
| (1,414) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:5:GLN:HB3 | 7 | 0.62 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 16 | 0.62 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 16 | 0.62 |
| (1,189) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 31 | 0.62 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 7 | 0.62 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 7 | 0.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 7 | 0.62 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 7 | 0.62 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 10 | 0.62 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 46 | 0.62 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 48 | 0.62 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 2 | 0.61 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 48 | 0.61 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 12 | 0.61 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 48 | 0.61 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.61 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.61 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.61 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 4 | 0.61 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 11 | 0.61 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 15 | 0.61 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 21 | 0.61 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 24 | 0.61 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 29 | 0.61 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 36 | 0.61 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 37 | 0.61 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 42 | 0.61 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 44 | 0.61 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 49 | 0.61 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 50 | 0.61 |
| (2,814) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 45 | 0.61 |
| (2,808) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE1 | 20 | 0.61 |
| (2,808) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE2 | 20 | 0.61 |
| (2,808) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE3 | 20 | 0.61 |
| (2,802) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 14 | 0.61 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 47 | 0.61 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 9 | 0.61 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 12 | 0.61 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 14 | 0.61 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 18 | 0.61 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 27 | 0.61 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 29 | 0.61 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 31 | 0.61 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 43 | 0.61 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.61 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.61 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.61 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 49 | 0.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 12 | 0.61 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 13 | 0.61 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 18 | 0.61 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 27 | 0.61 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 43 | 0.61 |
| (2,462) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 45 | 0.61 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 2 | 0.61 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 48 | 0.61 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 12 | 0.61 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 14 | 0.61 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 18 | 0.61 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 27 | 0.61 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 29 | 0.61 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 31 | 0.61 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 43 | 0.61 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 12 | 0.61 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 13 | 0.61 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 18 | 0.61 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 27 | 0.61 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 43 | 0.61 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 12 | 0.61 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 48 | 0.61 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 47 | 0.61 |
| (2,370) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE1 | 20 | 0.61 |
| (2,370) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE2 | 20 | 0.61 |
| (2,370) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE3 | 20 | 0.61 |
| (2,359) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 14 | 0.61 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 9 | 0.61 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 4 | 0.61 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 11 | 0.61 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 15 | 0.61 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 21 | 0.61 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 24 | 0.61 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 29 | 0.61 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 36 | 0.61 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 37 | 0.61 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 42 | 0.61 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 44 | 0.61 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 49 | 0.61 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 50 | 0.61 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 49 | 0.61 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 2 | 0.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 48 | 0.61 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 12 | 0.61 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 48 | 0.61 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.61 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.61 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.61 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 4 | 0.61 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 11 | 0.61 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 15 | 0.61 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 21 | 0.61 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 24 | 0.61 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 29 | 0.61 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 36 | 0.61 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 37 | 0.61 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 42 | 0.61 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 44 | 0.61 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 49 | 0.61 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 50 | 0.61 |
| (1,789) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 45 | 0.61 |
| (1,783) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE1 | 20 | 0.61 |
| (1,783) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE2 | 20 | 0.61 |
| (1,783) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE3 | 20 | 0.61 |
| (1,777) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 14 | 0.61 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 47 | 0.61 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 9 | 0.61 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 12 | 0.61 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 14 | 0.61 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 18 | 0.61 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 27 | 0.61 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 29 | 0.61 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 31 | 0.61 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 43 | 0.61 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 49 | 0.61 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 12 | 0.61 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 13 | 0.61 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 18 | 0.61 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 27 | 0.61 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 43 | 0.61 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 38 | 0.61 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 40 | 0.61 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 40 | 0.61 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 12 | 0.61 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 12 | 0.61 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 12 | 0.61 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 50 | 0.61 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 50 | 0.61 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 50 | 0.61 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:14:ASN:HB3 | 48 | 0.61 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:14:ASN:HB3 | 48 | 0.61 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:14:ASN:HB3 | 48 | 0.61 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 47 | 0.61 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 12 | 0.61 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 21 | 0.61 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 45 | 0.61 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 11 | 0.61 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 21 | 0.61 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 21 | 0.61 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 21 | 0.61 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 21 | 0.61 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 21 | 0.61 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 21 | 0.61 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 33 | 0.61 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 33 | 0.61 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 33 | 0.61 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 33 | 0.61 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 33 | 0.61 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 33 | 0.61 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 33 | 0.6 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 11 | 0.6 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 13 | 0.6 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 17 | 0.6 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 35 | 0.6 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 47 | 0.6 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 6 | 0.6 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 6 | 0.6 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 11 | 0.6 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 11 | 0.6 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 46 | 0.6 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 46 | 0.6 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 8 | 0.6 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 8 | 0.6 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 8 | 0.6 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 3 | 0.6 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 19 | 0.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 22 | 0.6 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 28 | 0.6 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 32 | 0.6 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 33 | 0.6 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 34 | 0.6 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 38 | 0.6 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 40 | 0.6 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 47 | 0.6 |
| (2,814) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 32 | 0.6 |
| (2,808) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE1 | 44 | 0.6 |
| (2,808) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE2 | 44 | 0.6 |
| (2,808) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE3 | 44 | 0.6 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 15 | 0.6 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 36 | 0.6 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 13 | 0.6 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 40 | 0.6 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 8 | 0.6 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 8 | 0.6 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 8 | 0.6 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.6 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 49 | 0.6 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 49 | 0.6 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 49 | 0.6 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 39 | 0.6 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 39 | 0.6 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 39 | 0.6 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 27 | 0.6 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 4 | 0.6 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 4 | 0.6 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 4 | 0.6 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 49 | 0.6 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 49 | 0.6 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 49 | 0.6 |
| (2,462) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 32 | 0.6 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 33 | 0.6 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 27 | 0.6 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 13 | 0.6 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 40 | 0.6 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 39 | 0.6 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 39 | 0.6 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 39 | 0.6 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 4 | 0.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 4 | 0.6 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 4 | 0.6 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 49 | 0.6 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 49 | 0.6 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 49 | 0.6 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 11 | 0.6 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 13 | 0.6 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 17 | 0.6 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 35 | 0.6 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 47 | 0.6 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 15 | 0.6 |
| (2,370) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE1 | 44 | 0.6 |
| (2,370) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE2 | 44 | 0.6 |
| (2,370) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE3 | 44 | 0.6 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 36 | 0.6 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 6 | 0.6 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 6 | 0.6 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 11 | 0.6 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 11 | 0.6 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 46 | 0.6 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 46 | 0.6 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 3 | 0.6 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 19 | 0.6 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 22 | 0.6 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 28 | 0.6 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 32 | 0.6 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 33 | 0.6 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 34 | 0.6 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 38 | 0.6 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 40 | 0.6 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 47 | 0.6 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 33 | 0.6 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 11 | 0.6 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 13 | 0.6 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 17 | 0.6 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 35 | 0.6 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 47 | 0.6 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 6 | 0.6 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 6 | 0.6 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 11 | 0.6 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 11 | 0.6 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 46 | 0.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 46 | 0.6 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 8 | 0.6 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 8 | 0.6 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 8 | 0.6 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 3 | 0.6 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 19 | 0.6 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 22 | 0.6 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 28 | 0.6 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 32 | 0.6 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 33 | 0.6 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 34 | 0.6 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 38 | 0.6 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 40 | 0.6 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 47 | 0.6 |
| (1,789) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 32 | 0.6 |
| (1,783) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE1 | 44 | 0.6 |
| (1,783) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE2 | 44 | 0.6 |
| (1,783) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE3 | 44 | 0.6 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 15 | 0.6 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 36 | 0.6 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 13 | 0.6 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 40 | 0.6 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 39 | 0.6 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 39 | 0.6 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 39 | 0.6 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 27 | 0.6 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 4 | 0.6 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 4 | 0.6 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 4 | 0.6 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 49 | 0.6 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 49 | 0.6 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 49 | 0.6 |
| (1,451) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:15:VAL:HG22 | 3 | 0.6 |
| (1,451) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:15:VAL:HG21 | 3 | 0.6 |
| (1,451) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:15:VAL:HG23 | 3 | 0.6 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 40 | 0.6 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 40 | 0.6 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 40 | 0.6 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 39 | 0.6 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 39 | 0.6 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 39 | 0.6 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 37 | 0.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 37 | 0.6 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 37 | 0.6 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 34 | 0.6 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 6 | 0.6 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 17 | 0.6 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 44 | 0.6 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 6 | 0.6 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 17 | 0.6 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 34 | 0.6 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 48 | 0.6 |
| (1,136) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 26 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 7 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 7 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 7 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 7 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 7 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 7 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 10 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 10 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 10 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 10 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 10 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 10 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 22 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 22 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 22 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 22 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 22 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 22 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 24 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 24 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 24 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 24 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 24 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 24 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 28 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 28 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 28 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 28 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 28 | 0.6 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 28 | 0.6 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 3 | 0.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 26 | 0.59 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 5 | 0.59 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 41 | 0.59 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 20 | 0.59 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 29 | 0.59 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 10 | 0.59 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 12 | 0.59 |
| (2,820) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 23 | 0.59 |
| (2,808) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE1 | 8 | 0.59 |
| (2,808) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE2 | 8 | 0.59 |
| (2,808) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE3 | 8 | 0.59 |
| (2,802) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 43 | 0.59 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 3 | 0.59 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 11 | 0.59 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 44 | 0.59 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 47 | 0.59 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 6 | 0.59 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 31 | 0.59 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 38 | 0.59 |
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 48 | 0.59 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 3 | 0.59 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 26 | 0.59 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 3 | 0.59 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 11 | 0.59 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 44 | 0.59 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 47 | 0.59 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 6 | 0.59 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 31 | 0.59 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 38 | 0.59 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 5 | 0.59 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 41 | 0.59 |
| (2,370) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE1 | 8 | 0.59 |
| (2,370) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE2 | 8 | 0.59 |
| (2,370) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE3 | 8 | 0.59 |
| (2,359) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 43 | 0.59 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 48 | 0.59 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 20 | 0.59 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 29 | 0.59 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 10 | 0.59 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 12 | 0.59 |
| (2,236) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 23 | 0.59 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 16 | 0.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 16 | 0.59 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 41 | 0.59 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 41 | 0.59 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 3 | 0.59 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 26 | 0.59 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 5 | 0.59 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 41 | 0.59 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 20 | 0.59 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 29 | 0.59 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 10 | 0.59 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 12 | 0.59 |
| (1,794) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:18:VAL:H | 23 | 0.59 |
| (1,783) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE1 | 8 | 0.59 |
| (1,783) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE2 | 8 | 0.59 |
| (1,783) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HE3 | 8 | 0.59 |
| (1,777) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 43 | 0.59 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 3 | 0.59 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 11 | 0.59 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 44 | 0.59 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 47 | 0.59 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 6 | 0.59 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 31 | 0.59 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 38 | 0.59 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 48 | 0.59 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 22 | 0.59 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 16 | 0.59 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 35 | 0.59 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 41 | 0.59 |
| (1,136) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 17 | 0.59 |
| (1,136) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 27 | 0.59 |
| (1,136) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 35 | 0.59 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 16 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 5 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 5 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 5 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 5 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 5 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 5 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 6 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 6 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 6 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 6 | 0.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 6 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 6 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 8 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 8 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 8 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 8 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 8 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 8 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 29 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 29 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 29 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 29 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 29 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 29 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 39 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 39 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 39 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 39 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 39 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 39 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 40 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 40 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 40 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 40 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 40 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 40 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 44 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 44 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 44 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 44 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 44 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 44 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 46 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 46 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 46 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 46 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 46 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 46 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 49 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 49 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 49 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 49 | 0.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 49 | 0.59 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 49 | 0.59 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 20 | 0.58 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 47 | 0.58 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 17 | 0.58 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 20 | 0.58 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 27 | 0.58 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 36 | 0.58 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 1 | 0.58 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 1 | 0.58 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.58 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.58 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.58 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.58 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.58 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.58 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 40 | 0.58 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 40 | 0.58 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 40 | 0.58 |
| (2,814) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 4 | 0.58 |
| (2,802) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 8 | 0.58 |
| (2,802) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 21 | 0.58 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 10 | 0.58 |
| (2,711) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:H | 2 | 0.58 |
| (2,711) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:H | 12 | 0.58 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.58 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.58 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.58 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.58 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.58 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.58 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.58 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.58 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.58 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.58 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.58 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.58 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 40 | 0.58 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 40 | 0.58 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 40 | 0.58 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 49 | 0.58 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 49 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 49 | 0.58 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 2 | 0.58 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 8 | 0.58 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 15 | 0.58 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 25 | 0.58 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 34 | 0.58 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 36 | 0.58 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 46 | 0.58 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 48 | 0.58 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 42 | 0.58 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 42 | 0.58 |
| (2,520) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 42 | 0.58 |
| (2,462) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 4 | 0.58 |
| (2,460) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:H | 2 | 0.58 |
| (2,460) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:H | 12 | 0.58 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 17 | 0.58 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 20 | 0.58 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.58 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.58 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.58 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.58 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.58 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.58 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 49 | 0.58 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 49 | 0.58 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 49 | 0.58 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 2 | 0.58 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 8 | 0.58 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 15 | 0.58 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 25 | 0.58 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 34 | 0.58 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 36 | 0.58 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 46 | 0.58 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 48 | 0.58 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 42 | 0.58 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 42 | 0.58 |
| (2,418) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 42 | 0.58 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 27 | 0.58 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 36 | 0.58 |
| (2,359) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 8 | 0.58 |
| (2,359) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 21 | 0.58 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 10 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 1 | 0.58 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 1 | 0.58 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 20 | 0.58 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 47 | 0.58 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 20 | 0.58 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 47 | 0.58 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 17 | 0.58 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 20 | 0.58 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 27 | 0.58 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 36 | 0.58 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 1 | 0.58 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 1 | 0.58 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.58 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.58 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.58 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.58 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.58 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.58 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 40 | 0.58 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 40 | 0.58 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 40 | 0.58 |
| (1,789) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 4 | 0.58 |
| (1,777) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 8 | 0.58 |
| (1,777) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 21 | 0.58 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 10 | 0.58 |
| (1,687) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:H | 2 | 0.58 |
| (1,687) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:H | 12 | 0.58 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.58 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.58 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.58 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.58 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.58 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.58 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 49 | 0.58 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 49 | 0.58 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 49 | 0.58 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 2 | 0.58 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 8 | 0.58 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 15 | 0.58 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 25 | 0.58 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 34 | 0.58 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 36 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 46 | 0.58 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 48 | 0.58 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD21 | 42 | 0.58 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD22 | 42 | 0.58 |
| (1,510) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HD23 | 42 | 0.58 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 5 | 0.58 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 5 | 0.58 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 12 | 0.58 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 12 | 0.58 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 25 | 0.58 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 25 | 0.58 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 39 | 0.58 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 39 | 0.58 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 48 | 0.58 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 48 | 0.58 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 33 | 0.58 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 33 | 0.58 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 33 | 0.58 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 11 | 0.58 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 15 | 0.58 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 19 | 0.58 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 42 | 0.58 |
| (1,136) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 25 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 1 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 1 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 1 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 1 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 1 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 1 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 3 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 3 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 3 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 3 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 3 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 3 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 9 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 9 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 9 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 9 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 9 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 9 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 16 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 16 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 16 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 16 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 16 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 16 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 31 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 31 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 31 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 31 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 31 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 31 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 38 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 38 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 38 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 38 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 38 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 38 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 41 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 41 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 41 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 41 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 41 | 0.58 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 41 | 0.58 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 6 | 0.57 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 46 | 0.57 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 22 | 0.57 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 40 | 0.57 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.57 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.57 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.57 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 13 | 0.57 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 9 | 0.57 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 10 | 0.57 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 32 | 0.57 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 32 | 0.57 |
| (2,711) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:H | 8 | 0.57 |
| (2,711) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:H | 17 | 0.57 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.57 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.57 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.57 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 4 | 0.57 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 4 | 0.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 4 | 0.57 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 5 | 0.57 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 5 | 0.57 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 5 | 0.57 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 28 | 0.57 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 32 | 0.57 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 45 | 0.57 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 32 | 0.57 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 32 | 0.57 |
| (2,460) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:H | 8 | 0.57 |
| (2,460) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:H | 17 | 0.57 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 6 | 0.57 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 46 | 0.57 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 9 | 0.57 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 10 | 0.57 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 4 | 0.57 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 4 | 0.57 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 4 | 0.57 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 5 | 0.57 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 5 | 0.57 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 5 | 0.57 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 28 | 0.57 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 32 | 0.57 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 45 | 0.57 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 22 | 0.57 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 13 | 0.57 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 40 | 0.57 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 36 | 0.57 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 36 | 0.57 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 39 | 0.57 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 39 | 0.57 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 40 | 0.57 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 40 | 0.57 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 6 | 0.57 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 46 | 0.57 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 22 | 0.57 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 40 | 0.57 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.57 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.57 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.57 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 13 | 0.57 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 9 | 0.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 10 | 0.57 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 32 | 0.57 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 32 | 0.57 |
| (1,687) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:H | 8 | 0.57 |
| (1,687) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:H | 17 | 0.57 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 4 | 0.57 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 4 | 0.57 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 4 | 0.57 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 5 | 0.57 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 5 | 0.57 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 5 | 0.57 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 28 | 0.57 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 32 | 0.57 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 45 | 0.57 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 35 | 0.57 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 35 | 0.57 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 35 | 0.57 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 34 | 0.57 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 36 | 0.57 |
| (1,136) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 30 | 0.57 |
| (1,136) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 50 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 11 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 11 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 11 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 11 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 11 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 11 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 34 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 34 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 34 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 34 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 34 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 34 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 36 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 36 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 36 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 36 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 36 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 36 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 50 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 50 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 50 | 0.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 50 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 50 | 0.57 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 50 | 0.57 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 12 | 0.56 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 14 | 0.56 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 31 | 0.56 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 18 | 0.56 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 24 | 0.56 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 32 | 0.56 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 3 | 0.56 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 3 | 0.56 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 31 | 0.56 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 31 | 0.56 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 15 | 0.56 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.56 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.56 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.56 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 16 | 0.56 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.56 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.56 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.56 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 42 | 0.56 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 42 | 0.56 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 42 | 0.56 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 42 | 0.56 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 42 | 0.56 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 42 | 0.56 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 18 | 0.56 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 24 | 0.56 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 32 | 0.56 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 16 | 0.56 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 12 | 0.56 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 14 | 0.56 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 31 | 0.56 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 3 | 0.56 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 3 | 0.56 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 31 | 0.56 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 31 | 0.56 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 15 | 0.56 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 12 | 0.56 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 14 | 0.56 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 31 | 0.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 18 | 0.56 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 24 | 0.56 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 32 | 0.56 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 3 | 0.56 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 3 | 0.56 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 31 | 0.56 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 31 | 0.56 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 15 | 0.56 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.56 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.56 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.56 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 16 | 0.56 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 42 | 0.56 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 42 | 0.56 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 42 | 0.56 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 15 | 0.56 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 15 | 0.56 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 41 | 0.56 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 41 | 0.56 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 4 | 0.56 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 25 | 0.56 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 25 | 0.56 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 25 | 0.56 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 8 | 0.56 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 14 | 0.56 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 20 | 0.56 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 46 | 0.56 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 9 | 0.56 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 9 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 12 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 12 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 12 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 12 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 12 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 12 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 17 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 17 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 17 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 17 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 17 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 17 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 25 | 0.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 25 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 25 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 25 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 25 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 25 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 27 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 27 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 27 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 27 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 27 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 27 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 30 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 30 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 30 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 30 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 30 | 0.56 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 30 | 0.56 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 50 | 0.55 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 39 | 0.55 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 32 | 0.55 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.55 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.55 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.55 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.55 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.55 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.55 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.55 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.55 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.55 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.55 |
| (2,802) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 25 | 0.55 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 22 | 0.55 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 46 | 0.55 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 49 | 0.55 |
| (2,711) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:H | 36 | 0.55 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.55 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.55 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.55 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.55 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.55 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.55 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.55 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.55 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 19 | 0.55 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 22 | 0.55 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 33 | 0.55 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 10 | 0.55 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 10 | 0.55 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 10 | 0.55 |
| (2,460) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:H | 36 | 0.55 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 19 | 0.55 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 22 | 0.55 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 39 | 0.55 |
| (2,359) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 25 | 0.55 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 22 | 0.55 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 46 | 0.55 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 49 | 0.55 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 50 | 0.55 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.55 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 32 | 0.55 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 33 | 0.55 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 13 | 0.55 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 13 | 0.55 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 50 | 0.55 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 39 | 0.55 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 32 | 0.55 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.55 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.55 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.55 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.55 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.55 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.55 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.55 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.55 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.55 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.55 |
| (1,777) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 25 | 0.55 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 22 | 0.55 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 46 | 0.55 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 49 | 0.55 |
| (1,687) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:H | 36 | 0.55 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 19 | 0.55 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 22 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 33 | 0.55 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 20 | 0.55 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 20 | 0.55 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 38 | 0.55 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 38 | 0.55 |
| (1,262) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 3 | 0.55 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 10 | 0.55 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 10 | 0.55 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 10 | 0.55 |
| (1,189) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 48 | 0.55 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 26 | 0.55 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 26 | 0.55 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 26 | 0.55 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:14:ASN:HB3 | 15 | 0.55 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:14:ASN:HB3 | 15 | 0.55 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:14:ASN:HB3 | 15 | 0.55 |
| (1,170) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 39 | 0.55 |
| (1,170) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 39 | 0.55 |
| (1,170) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 39 | 0.55 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 2 | 0.55 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 32 | 0.55 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 3 | 0.55 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 8 | 0.55 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 42 | 0.55 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 43 | 0.55 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 2 | 0.55 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 17 | 0.55 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 17 | 0.55 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 17 | 0.55 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 17 | 0.55 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 17 | 0.55 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 17 | 0.55 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 35 | 0.55 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 35 | 0.55 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 35 | 0.55 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 35 | 0.55 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 35 | 0.55 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 35 | 0.55 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 1 | 0.54 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 11 | 0.54 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 34 | 0.54 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 36 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 1 | 0.54 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 29 | 0.54 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 42 | 0.54 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 3 | 0.54 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 27 | 0.54 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 27 | 0.54 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 9 | 0.54 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 31 | 0.54 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.54 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 32 | 0.54 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 32 | 0.54 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 32 | 0.54 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.54 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.54 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.54 |
| (2,814) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 39 | 0.54 |
| (2,802) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 6 | 0.54 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 10 | 0.54 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 19 | 0.54 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 23 | 0.54 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 32 | 0.54 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 5 | 0.54 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 41 | 0.54 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 32 | 0.54 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 32 | 0.54 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 32 | 0.54 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.54 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.54 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.54 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 7 | 0.54 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 17 | 0.54 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 24 | 0.54 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 30 | 0.54 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 35 | 0.54 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 41 | 0.54 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 50 | 0.54 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 26 | 0.54 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 26 | 0.54 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 26 | 0.54 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 7 | 0.54 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 7 | 0.54 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 7 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,554) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 13 | 0.54 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 27 | 0.54 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 27 | 0.54 |
| (2,462) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 39 | 0.54 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 27 | 0.54 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 27 | 0.54 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 1 | 0.54 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 11 | 0.54 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 34 | 0.54 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 36 | 0.54 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 7 | 0.54 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 17 | 0.54 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 24 | 0.54 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 30 | 0.54 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 35 | 0.54 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 41 | 0.54 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 50 | 0.54 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 3 | 0.54 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 10 | 0.54 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 19 | 0.54 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 23 | 0.54 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 32 | 0.54 |
| (2,359) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 6 | 0.54 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 5 | 0.54 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 41 | 0.54 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 1 | 0.54 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 29 | 0.54 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 42 | 0.54 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 27 | 0.54 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 27 | 0.54 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.54 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 9 | 0.54 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 31 | 0.54 |
| (2,102) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 13 | 0.54 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 1 | 0.54 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 11 | 0.54 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 34 | 0.54 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 36 | 0.54 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 1 | 0.54 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 29 | 0.54 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 42 | 0.54 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 3 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 27 | 0.54 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 27 | 0.54 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 9 | 0.54 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 31 | 0.54 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.54 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 32 | 0.54 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 32 | 0.54 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 32 | 0.54 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.54 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.54 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.54 |
| (1,789) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 39 | 0.54 |
| (1,777) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 6 | 0.54 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 10 | 0.54 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 19 | 0.54 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 23 | 0.54 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 32 | 0.54 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 5 | 0.54 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 41 | 0.54 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 7 | 0.54 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 17 | 0.54 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 24 | 0.54 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 30 | 0.54 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 35 | 0.54 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 41 | 0.54 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 50 | 0.54 |
| (1,544) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 13 | 0.54 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 27 | 0.54 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 27 | 0.54 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 29 | 0.54 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 48 | 0.54 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 2 | 0.54 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 46 | 0.54 |
| (1,154) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:20:PHE:HA | 26 | 0.54 |
| (1,136) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 41 | 0.54 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 43 | 0.54 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 18 | 0.54 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 18 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 5 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 5 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 5 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 5 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 5 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 5 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 9 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 9 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 9 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 9 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 9 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 9 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 25 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 25 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 25 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 25 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 25 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 25 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 27 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 27 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 27 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 27 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 27 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 27 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 30 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 30 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 30 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 30 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 30 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 30 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 35 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 35 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 35 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 35 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 35 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 35 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 50 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 50 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 50 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 50 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 50 | 0.54 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 50 | 0.54 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 21 | 0.54 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 21 | 0.54 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 21 | 0.54 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 21 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 33 | 0.54 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 33 | 0.54 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 33 | 0.54 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 33 | 0.54 |
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:HE21 | 10 | 0.54 |
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:HE21 | 10 | 0.54 |
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 10 | 0.54 |
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 10 | 0.54 |
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:HE21 | 43 | 0.54 |
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:HE21 | 43 | 0.54 |
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 43 | 0.54 |
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 43 | 0.54 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 26 | 0.54 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 26 | 0.54 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 26 | 0.54 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 26 | 0.54 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 26 | 0.54 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 26 | 0.54 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 22 | 0.53 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 48 | 0.53 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 8 | 0.53 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 17 | 0.53 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 20 | 0.53 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 24 | 0.53 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 44 | 0.53 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 18 | 0.53 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 18 | 0.53 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 18 | 0.53 |
| (2,814) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 23 | 0.53 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 1 | 0.53 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 6 | 0.53 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 22 | 0.53 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 37 | 0.53 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 24 | 0.53 |
| (2,733) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 38 | 0.53 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 17 | 0.53 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 17 | 0.53 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 18 | 0.53 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 18 | 0.53 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 18 | 0.53 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 11 | 0.53 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 11 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 11 | 0.53 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 1 | 0.53 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 16 | 0.53 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 20 | 0.53 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 21 | 0.53 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 23 | 0.53 |
| (2,582) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 47 | 0.53 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 17 | 0.53 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 17 | 0.53 |
| (2,462) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 23 | 0.53 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 8 | 0.53 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 1 | 0.53 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 16 | 0.53 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 20 | 0.53 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 21 | 0.53 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 23 | 0.53 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 44 | 0.53 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 1 | 0.53 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 6 | 0.53 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 22 | 0.53 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 37 | 0.53 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 24 | 0.53 |
| (2,323) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 38 | 0.53 |
| (2,315) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 47 | 0.53 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 17 | 0.53 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 20 | 0.53 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 24 | 0.53 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 22 | 0.53 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 48 | 0.53 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 42 | 0.53 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 42 | 0.53 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 45 | 0.53 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 45 | 0.53 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 22 | 0.53 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 48 | 0.53 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 8 | 0.53 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 17 | 0.53 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 20 | 0.53 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 24 | 0.53 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 44 | 0.53 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 18 | 0.53 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 18 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 18 | 0.53 |
| (1,789) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 23 | 0.53 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 1 | 0.53 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 6 | 0.53 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 22 | 0.53 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 37 | 0.53 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 24 | 0.53 |
| (1,709) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 38 | 0.53 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 17 | 0.53 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 17 | 0.53 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 3 | 0.53 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 1 | 0.53 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 16 | 0.53 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 20 | 0.53 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 21 | 0.53 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 23 | 0.53 |
| (1,566) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 47 | 0.53 |
| (1,414) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:5:GLN:HB3 | 6 | 0.53 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 5 | 0.53 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 23 | 0.53 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 38 | 0.53 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 38 | 0.53 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 38 | 0.53 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 24 | 0.53 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 24 | 0.53 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 24 | 0.53 |
| (1,173) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 37 | 0.53 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 1 | 0.53 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 15 | 0.53 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 16 | 0.53 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 25 | 0.53 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 36 | 0.53 |
| (1,154) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:20:PHE:HA | 38 | 0.53 |
| (1,154) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:20:PHE:HA | 47 | 0.53 |
| (1,136) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 5 | 0.53 |
| (1,136) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 9 | 0.53 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 16 | 0.53 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 16 | 0.53 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 16 | 0.53 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 16 | 0.53 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 16 | 0.53 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 16 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 27 | 0.53 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 27 | 0.53 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 26 | 0.53 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 26 | 0.53 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 26 | 0.53 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 26 | 0.53 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 26 | 0.53 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 26 | 0.53 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 41 | 0.53 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 41 | 0.53 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 41 | 0.53 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 41 | 0.53 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 41 | 0.53 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 41 | 0.53 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 48 | 0.53 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 48 | 0.53 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 48 | 0.53 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 48 | 0.53 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 48 | 0.53 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 48 | 0.53 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 9 | 0.52 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 8 | 0.52 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 13 | 0.52 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 15 | 0.52 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 16 | 0.52 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.52 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.52 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.52 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 23 | 0.52 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 23 | 0.52 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.52 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.52 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.52 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.52 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 22 | 0.52 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 22 | 0.52 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 22 | 0.52 |
| (2,814) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 41 | 0.52 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 13 | 0.52 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 20 | 0.52 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 21 | 0.52 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 28 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 36 | 0.52 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 3 | 0.52 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 15 | 0.52 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 33 | 0.52 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.52 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.52 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.52 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 22 | 0.52 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 22 | 0.52 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 22 | 0.52 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG21 | 1:A:12:GLN:HE22 | 40 | 0.52 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG22 | 1:A:12:GLN:HE22 | 40 | 0.52 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG23 | 1:A:12:GLN:HE22 | 40 | 0.52 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 23 | 0.52 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 23 | 0.52 |
| (2,575) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 23 | 0.52 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 39 | 0.52 |
| (2,462) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 41 | 0.52 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 9 | 0.52 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 39 | 0.52 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 13 | 0.52 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 20 | 0.52 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 21 | 0.52 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 28 | 0.52 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 36 | 0.52 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 3 | 0.52 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 15 | 0.52 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 33 | 0.52 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 8 | 0.52 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 13 | 0.52 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 15 | 0.52 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 16 | 0.52 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 23 | 0.52 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 23 | 0.52 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.52 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.52 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.52 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.52 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 43 | 0.52 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 43 | 0.52 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 5 | 0.52 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 5 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 28 | 0.52 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 28 | 0.52 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 9 | 0.52 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 8 | 0.52 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 13 | 0.52 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 15 | 0.52 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 16 | 0.52 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.52 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.52 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.52 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 23 | 0.52 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 23 | 0.52 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.52 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.52 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.52 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.52 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 22 | 0.52 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 22 | 0.52 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 22 | 0.52 |
| (1,789) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 41 | 0.52 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 13 | 0.52 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 20 | 0.52 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 21 | 0.52 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 28 | 0.52 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 36 | 0.52 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 3 | 0.52 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 15 | 0.52 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 33 | 0.52 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 39 | 0.52 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 19 | 0.52 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 19 | 0.52 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 18 | 0.52 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 24 | 0.52 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 37 | 0.52 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 9 | 0.52 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 9 | 0.52 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 9 | 0.52 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 27 | 0.52 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 27 | 0.52 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 27 | 0.52 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 31 | 0.52 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 31 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 31 | 0.52 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:14:ASN:HB3 | 3 | 0.52 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:14:ASN:HB3 | 3 | 0.52 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:14:ASN:HB3 | 3 | 0.52 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 22 | 0.52 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 27 | 0.52 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 19 | 0.52 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 41 | 0.52 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 45 | 0.52 |
| (1,154) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:20:PHE:HA | 39 | 0.52 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 49 | 0.52 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 49 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 5 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 5 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 5 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 5 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 6 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 6 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 6 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 6 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 7 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 7 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 7 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 7 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 8 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 8 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 8 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 8 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 10 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 10 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 10 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 10 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 22 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 22 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 22 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 22 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 24 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 24 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 24 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 24 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 28 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 28 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 28 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 28 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 29 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 29 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 29 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 29 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 39 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 39 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 39 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 39 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 40 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 40 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 40 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 40 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 44 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 44 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 44 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 44 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 46 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 46 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 46 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 46 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 49 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 49 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 49 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 49 | 0.52 |
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:HE21 | 25 | 0.52 |
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:HE21 | 25 | 0.52 |
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 25 | 0.52 |
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 25 | 0.52 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 14 | 0.52 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 14 | 0.52 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 14 | 0.52 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 14 | 0.52 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 14 | 0.52 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 14 | 0.52 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 18 | 0.52 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 18 | 0.52 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 18 | 0.52 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 18 | 0.52 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 18 | 0.52 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 18 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 1 | 0.51 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 19 | 0.51 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 21 | 0.51 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 44 | 0.51 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 30 | 0.51 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 34 | 0.51 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 36 | 0.51 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 37 | 0.51 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 7 | 0.51 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 7 | 0.51 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 18 | 0.51 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 18 | 0.51 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.51 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.51 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.51 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 40 | 0.51 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 9 | 0.51 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 9 | 0.51 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 9 | 0.51 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 13 | 0.51 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 13 | 0.51 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 13 | 0.51 |
| (2,814) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 14 | 0.51 |
| (2,814) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 16 | 0.51 |
| (2,814) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 48 | 0.51 |
| (2,807) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 20 | 0.51 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 31 | 0.51 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 35 | 0.51 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 49 | 0.51 |
| (2,794) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 49 | 0.51 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.51 |
| (2,733) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 47 | 0.51 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 9 | 0.51 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 9 | 0.51 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 9 | 0.51 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 13 | 0.51 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 13 | 0.51 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 13 | 0.51 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 30 | 0.51 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 30 | 0.51 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 30 | 0.51 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 37 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 37 | 0.51 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 37 | 0.51 |
| (2,462) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 14 | 0.51 |
| (2,462) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 16 | 0.51 |
| (2,462) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 48 | 0.51 |
| (2,461) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 49 | 0.51 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 21 | 0.51 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 44 | 0.51 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 30 | 0.51 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 30 | 0.51 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 30 | 0.51 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 31 | 0.51 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 35 | 0.51 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 49 | 0.51 |
| (2,377) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 20 | 0.51 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.51 |
| (2,323) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 47 | 0.51 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 40 | 0.51 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 30 | 0.51 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 34 | 0.51 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 36 | 0.51 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 37 | 0.51 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 7 | 0.51 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 7 | 0.51 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 18 | 0.51 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 18 | 0.51 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.51 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.51 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.51 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 1 | 0.51 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 19 | 0.51 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:H | 3 | 0.51 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:H | 3 | 0.51 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 1 | 0.51 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 19 | 0.51 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 21 | 0.51 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 44 | 0.51 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 30 | 0.51 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 34 | 0.51 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 36 | 0.51 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 37 | 0.51 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 7 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 7 | 0.51 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 18 | 0.51 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 18 | 0.51 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.51 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.51 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.51 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 40 | 0.51 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 9 | 0.51 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 9 | 0.51 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 9 | 0.51 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 13 | 0.51 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 13 | 0.51 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 13 | 0.51 |
| (1,789) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 14 | 0.51 |
| (1,789) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 16 | 0.51 |
| (1,789) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 48 | 0.51 |
| (1,782) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 20 | 0.51 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 31 | 0.51 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 35 | 0.51 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 49 | 0.51 |
| (1,769) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 49 | 0.51 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.51 |
| (1,709) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 47 | 0.51 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 4 | 0.51 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 30 | 0.51 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 30 | 0.51 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 30 | 0.51 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 10 | 0.51 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 10 | 0.51 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 50 | 0.51 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 50 | 0.51 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 13 | 0.51 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 23 | 0.51 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 11 | 0.51 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 4 | 0.51 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 25 | 0.51 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 9 | 0.51 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 20 | 0.51 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 21 | 0.51 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 44 | 0.51 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 2 | 0.51 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 2 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 4 | 0.51 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 4 | 0.51 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 21 | 0.51 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 21 | 0.51 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 44 | 0.51 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 44 | 0.51 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 50 | 0.51 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 50 | 0.51 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 20 | 0.51 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 20 | 0.51 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 20 | 0.51 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 20 | 0.51 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 20 | 0.51 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 20 | 0.51 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 37 | 0.51 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 37 | 0.51 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 37 | 0.51 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 37 | 0.51 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 37 | 0.51 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 37 | 0.51 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 11 | 0.5 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 4 | 0.5 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 50 | 0.5 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 4 | 0.5 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 11 | 0.5 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 22 | 0.5 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 32 | 0.5 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 35 | 0.5 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 48 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 1 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 1 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 2 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 2 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 3 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 3 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 4 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 4 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 5 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 5 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 6 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 6 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 8 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 8 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 9 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 9 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 10 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 10 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 11 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 11 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 12 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 12 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 13 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 13 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 14 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 14 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 15 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 15 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 16 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 16 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 17 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 17 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 19 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 19 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 20 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 20 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 21 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 21 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 22 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 22 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 23 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 23 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 24 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 24 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 26 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 26 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 27 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 27 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 28 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 28 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 29 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 29 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 30 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 30 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 31 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 31 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 32 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 32 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 33 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 33 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 34 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 34 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 35 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 35 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 36 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 36 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 37 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 37 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 38 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 38 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 39 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 39 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 40 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 40 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 41 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 41 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 42 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 42 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 43 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 43 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 44 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 44 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 45 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 45 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 46 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 46 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 47 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 47 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 48 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 48 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 49 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 49 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 50 | 0.5 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 50 | 0.5 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 43 | 0.5 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.5 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 14 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 14 | 0.5 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 14 | 0.5 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.5 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.5 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.5 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 3 | 0.5 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 7 | 0.5 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 9 | 0.5 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 29 | 0.5 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 33 | 0.5 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 41 | 0.5 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 44 | 0.5 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 48 | 0.5 |
| (2,79) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 16 | 0.5 |
| (2,79) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 16 | 0.5 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 26 | 0.5 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 45 | 0.5 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 8 | 0.5 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 8 | 0.5 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 11 | 0.5 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 11 | 0.5 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 16 | 0.5 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 16 | 0.5 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 14 | 0.5 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 14 | 0.5 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 14 | 0.5 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.5 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.5 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.5 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 15 | 0.5 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 15 | 0.5 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 15 | 0.5 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 0.5 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 0.5 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 0.5 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 11 | 0.5 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 33 | 0.5 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 50 | 0.5 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 50 | 0.5 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 50 | 0.5 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 18 | 0.5 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 18 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 18 | 0.5 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 0.5 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 0.5 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 0.5 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 47 | 0.5 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 47 | 0.5 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 30 | 0.5 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 31 | 0.5 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 32 | 0.5 |
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 23 | 0.5 |
| (2,479) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 16 | 0.5 |
| (2,479) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 16 | 0.5 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 8 | 0.5 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 8 | 0.5 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 47 | 0.5 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 47 | 0.5 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 50 | 0.5 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 30 | 0.5 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 31 | 0.5 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 32 | 0.5 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 33 | 0.5 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 43 | 0.5 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 3 | 0.5 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 7 | 0.5 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 9 | 0.5 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 29 | 0.5 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 33 | 0.5 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 41 | 0.5 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 44 | 0.5 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 48 | 0.5 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 26 | 0.5 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 45 | 0.5 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 23 | 0.5 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 15 | 0.5 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 15 | 0.5 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 15 | 0.5 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 4 | 0.5 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 11 | 0.5 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 22 | 0.5 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 32 | 0.5 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 35 | 0.5 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 48 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 11 | 0.5 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 11 | 0.5 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 16 | 0.5 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 16 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 1 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 1 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 2 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 2 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 3 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 3 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 4 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 4 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 5 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 5 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 6 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 6 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 8 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 8 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 9 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 9 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 10 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 10 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 11 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 11 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 12 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 12 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 13 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 13 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 14 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 14 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 15 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 15 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 16 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 16 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 17 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 17 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 19 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 19 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 20 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 20 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 21 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 21 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 22 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 22 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 23 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 23 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 24 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 24 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 26 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 26 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 27 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 27 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 28 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 28 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 29 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 29 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 30 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 30 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 31 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 31 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 32 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 32 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 33 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 33 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 34 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 34 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 35 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 35 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 36 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 36 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 37 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 37 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 38 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 38 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 39 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 39 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 40 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 40 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 41 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 41 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 42 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 42 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 43 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 43 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 44 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 44 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 45 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 45 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 46 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 46 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 47 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 47 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 48 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 48 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 49 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 49 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 50 | 0.5 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 50 | 0.5 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.5 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 4 | 0.5 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 4 | 0.5 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 50 | 0.5 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 4 | 0.5 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 11 | 0.5 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 22 | 0.5 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 32 | 0.5 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 35 | 0.5 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 48 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 1 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 1 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 2 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 2 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 3 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 3 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 4 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 4 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 5 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 5 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 6 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 6 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 8 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 8 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 9 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 9 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 10 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 10 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 11 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 11 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 12 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 12 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 13 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 13 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 14 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 14 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 15 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 15 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 16 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 16 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 17 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 17 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 19 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 19 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 20 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 20 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 21 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 21 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 22 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 22 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 23 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 23 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 24 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 24 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 26 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 26 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 27 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 27 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 28 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 28 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 29 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 29 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 30 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 30 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 31 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 31 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 32 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 32 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 33 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 33 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 34 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 34 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 35 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 35 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 36 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 36 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 37 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 37 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 38 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 38 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 39 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 39 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 40 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 40 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 41 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 41 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 42 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 42 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 43 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 43 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 44 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 44 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 45 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 45 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 46 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 46 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 47 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 47 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 48 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 48 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 49 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 49 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 50 | 0.5 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 50 | 0.5 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 43 | 0.5 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.5 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 14 | 0.5 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 14 | 0.5 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 14 | 0.5 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.5 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.5 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 3 | 0.5 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 7 | 0.5 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 9 | 0.5 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 29 | 0.5 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 33 | 0.5 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 41 | 0.5 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 44 | 0.5 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 48 | 0.5 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 26 | 0.5 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 45 | 0.5 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 8 | 0.5 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 8 | 0.5 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 11 | 0.5 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 11 | 0.5 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 16 | 0.5 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 16 | 0.5 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 43 | 0.5 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 15 | 0.5 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 15 | 0.5 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 15 | 0.5 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 11 | 0.5 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 33 | 0.5 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 0.5 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 0.5 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 0.5 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 47 | 0.5 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 47 | 0.5 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 30 | 0.5 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 31 | 0.5 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 32 | 0.5 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 23 | 0.5 |
| (1,469) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 16 | 0.5 |
| (1,469) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 16 | 0.5 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 43 | 0.5 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 43 | 0.5 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 3 | 0.5 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 5 | 0.5 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 17 | 0.5 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 20 | 0.5 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 27 | 0.5 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 40 | 0.5 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 29 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 29 | 0.5 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 29 | 0.5 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 40 | 0.5 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 40 | 0.5 |
| (1,182) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 40 | 0.5 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 9 | 0.5 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 5 | 0.5 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 5 | 0.5 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 7 | 0.5 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 7 | 0.5 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 24 | 0.5 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 24 | 0.5 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 30 | 0.5 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 30 | 0.5 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 32 | 0.5 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 32 | 0.5 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 35 | 0.5 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 35 | 0.5 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 39 | 0.5 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 39 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 1 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 1 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 1 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 1 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 3 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 3 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 3 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 3 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 9 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 9 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 9 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 9 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 11 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 11 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 11 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 11 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 16 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 16 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 16 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 16 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 31 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 31 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 31 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 31 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 34 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 34 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 34 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 34 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 36 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 36 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 36 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 36 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 38 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 38 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 38 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 38 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 41 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 41 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 41 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 41 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 50 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 50 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 50 | 0.5 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 50 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 2 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 2 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 2 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 2 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 2 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 2 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 19 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 19 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 19 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 19 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 19 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 19 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 43 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 43 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 43 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 43 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 43 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 43 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 45 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 45 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 45 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 45 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 45 | 0.5 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 45 | 0.5 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 8 | 0.49 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 11 | 0.49 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 38 | 0.49 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 50 | 0.49 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 28 | 0.49 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 5 | 0.49 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 10 | 0.49 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 25 | 0.49 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 27 | 0.49 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 44 | 0.49 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 45 | 0.49 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.49 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 10 | 0.49 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 38 | 0.49 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.49 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.49 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.49 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.49 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.49 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.49 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 5 | 0.49 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 11 | 0.49 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 14 | 0.49 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 16 | 0.49 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 24 | 0.49 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 34 | 0.49 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 39 | 0.49 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 40 | 0.49 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 45 | 0.49 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.49 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 6 | 0.49 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 6 | 0.49 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 16 | 0.49 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 42 | 0.49 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 6 | 0.49 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 6 | 0.49 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.49 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.49 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.49 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.49 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.49 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 17 | 0.49 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 17 | 0.49 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 17 | 0.49 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG21 | 1:A:12:GLN:HE22 | 14 | 0.49 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG22 | 1:A:12:GLN:HE22 | 14 | 0.49 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG23 | 1:A:12:GLN:HE22 | 14 | 0.49 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 7 | 0.49 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 47 | 0.49 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 29 | 0.49 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 29 | 0.49 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 29 | 0.49 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 19 | 0.49 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 19 | 0.49 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 19 | 0.49 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 30 | 0.49 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 30 | 0.49 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 30 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 17 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 17 | 0.49 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 17 | 0.49 |
| (2,507) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 43 | 0.49 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 6 | 0.49 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 6 | 0.49 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 10 | 0.49 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 16 | 0.49 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 42 | 0.49 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 5 | 0.49 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 11 | 0.49 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 14 | 0.49 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 16 | 0.49 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 24 | 0.49 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 34 | 0.49 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 39 | 0.49 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 40 | 0.49 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 45 | 0.49 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.49 |
| (2,354) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 43 | 0.49 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 5 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 10 | 0.49 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 25 | 0.49 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 27 | 0.49 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 44 | 0.49 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 45 | 0.49 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 6 | 0.49 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 6 | 0.49 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.49 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 38 | 0.49 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 7 | 0.49 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 47 | 0.49 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 8 | 0.49 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 11 | 0.49 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 38 | 0.49 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 50 | 0.49 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 28 | 0.49 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 32 | 0.49 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 32 | 0.49 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 15 | 0.49 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 18 | 0.49 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 18 | 0.49 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 8 | 0.49 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 11 | 0.49 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 38 | 0.49 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 50 | 0.49 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 28 | 0.49 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 5 | 0.49 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 10 | 0.49 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 25 | 0.49 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 27 | 0.49 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 44 | 0.49 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 45 | 0.49 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.49 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 10 | 0.49 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 38 | 0.49 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.49 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.49 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.49 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.49 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.49 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.49 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 5 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 11 | 0.49 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 14 | 0.49 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 16 | 0.49 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 24 | 0.49 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 34 | 0.49 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 39 | 0.49 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 40 | 0.49 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 45 | 0.49 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.49 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 6 | 0.49 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 6 | 0.49 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 16 | 0.49 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 42 | 0.49 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 6 | 0.49 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 6 | 0.49 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 7 | 0.49 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 7 | 0.49 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 47 | 0.49 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 17 | 0.49 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 17 | 0.49 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 17 | 0.49 |
| (1,497) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 43 | 0.49 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 1 | 0.49 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 2 | 0.49 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 7 | 0.49 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 9 | 0.49 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 12 | 0.49 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 15 | 0.49 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 25 | 0.49 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 28 | 0.49 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 29 | 0.49 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 30 | 0.49 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 31 | 0.49 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 34 | 0.49 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 35 | 0.49 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 38 | 0.49 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 39 | 0.49 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 40 | 0.49 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 43 | 0.49 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 50 | 0.49 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 14 | 0.49 |
| (1,158) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:13:CYS:HB3 | 49 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 14 | 0.49 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 27 | 0.49 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 9 | 0.49 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 9 | 0.49 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 9 | 0.49 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 9 | 0.49 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 9 | 0.49 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 9 | 0.49 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 20 | 0.49 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 20 | 0.49 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 20 | 0.49 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 20 | 0.49 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 20 | 0.49 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 20 | 0.49 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 24 | 0.49 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 24 | 0.49 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 24 | 0.49 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 24 | 0.49 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 24 | 0.49 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 24 | 0.49 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 14 | 0.49 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 14 | 0.49 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 16 | 0.49 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 16 | 0.49 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 20 | 0.49 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 20 | 0.49 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 28 | 0.49 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 28 | 0.49 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 36 | 0.49 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 36 | 0.49 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 40 | 0.49 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 40 | 0.49 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 45 | 0.49 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 45 | 0.49 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 46 | 0.49 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 46 | 0.49 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 47 | 0.49 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 47 | 0.49 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 4 | 0.49 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 4 | 0.49 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 4 | 0.49 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 4 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 4 | 0.49 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 4 | 0.49 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 13 | 0.49 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 13 | 0.49 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 13 | 0.49 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 13 | 0.49 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 13 | 0.49 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 13 | 0.49 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 15 | 0.49 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 15 | 0.49 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 15 | 0.49 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 15 | 0.49 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 15 | 0.49 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 15 | 0.49 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 12 | 0.48 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 6 | 0.48 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 13 | 0.48 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 43 | 0.48 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 21 | 0.48 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 41 | 0.48 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 5 | 0.48 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 13 | 0.48 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 24 | 0.48 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 31 | 0.48 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 37 | 0.48 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 40 | 0.48 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.48 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.48 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.48 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.48 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.48 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 31 | 0.48 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 4 | 0.48 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 41 | 0.48 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 44 | 0.48 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 46 | 0.48 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.48 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 45 | 0.48 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 45 | 0.48 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 45 | 0.48 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 2 | 0.48 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 4 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 25 | 0.48 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 18 | 0.48 |
| (2,733) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 33 | 0.48 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 31 | 0.48 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 31 | 0.48 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 40 | 0.48 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 40 | 0.48 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 45 | 0.48 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 45 | 0.48 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 45 | 0.48 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 12 | 0.48 |
| (2,601) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 24 | 0.48 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 34 | 0.48 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 5 | 0.48 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 5 | 0.48 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 49 | 0.48 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 49 | 0.48 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 3 | 0.48 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 31 | 0.48 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 31 | 0.48 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 40 | 0.48 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 40 | 0.48 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 5 | 0.48 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 5 | 0.48 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 49 | 0.48 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 49 | 0.48 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 3 | 0.48 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 13 | 0.48 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 43 | 0.48 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 31 | 0.48 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 2 | 0.48 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 4 | 0.48 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 25 | 0.48 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 18 | 0.48 |
| (2,323) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 33 | 0.48 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 21 | 0.48 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 41 | 0.48 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.48 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 5 | 0.48 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 13 | 0.48 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 24 | 0.48 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 31 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 37 | 0.48 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 40 | 0.48 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.48 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.48 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.48 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.48 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.48 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 4 | 0.48 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 41 | 0.48 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 44 | 0.48 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 46 | 0.48 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 34 | 0.48 |
| (2,186) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 24 | 0.48 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 6 | 0.48 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 34 | 0.48 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 34 | 0.48 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 17 | 0.48 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 17 | 0.48 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 9 | 0.48 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 38 | 0.48 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 40 | 0.48 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 6 | 0.48 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 13 | 0.48 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 43 | 0.48 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 21 | 0.48 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 41 | 0.48 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 5 | 0.48 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 13 | 0.48 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 24 | 0.48 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 31 | 0.48 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 37 | 0.48 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 40 | 0.48 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.48 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.48 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.48 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.48 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.48 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 31 | 0.48 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 4 | 0.48 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 41 | 0.48 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 44 | 0.48 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 46 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.48 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 45 | 0.48 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 45 | 0.48 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 45 | 0.48 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 2 | 0.48 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 4 | 0.48 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 25 | 0.48 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 18 | 0.48 |
| (1,709) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 33 | 0.48 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 31 | 0.48 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 31 | 0.48 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 40 | 0.48 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 40 | 0.48 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 2 | 0.48 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 8 | 0.48 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 12 | 0.48 |
| (1,584) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 24 | 0.48 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 34 | 0.48 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 5 | 0.48 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 5 | 0.48 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 49 | 0.48 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 49 | 0.48 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 3 | 0.48 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 17 | 0.48 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 4 | 0.48 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 8 | 0.48 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 10 | 0.48 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 11 | 0.48 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 14 | 0.48 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 16 | 0.48 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 21 | 0.48 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 22 | 0.48 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 26 | 0.48 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 33 | 0.48 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 41 | 0.48 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 42 | 0.48 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 45 | 0.48 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 46 | 0.48 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 47 | 0.48 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 49 | 0.48 |
| (1,262) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 33 | 0.48 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 9 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 43 | 0.48 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 43 | 0.48 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 43 | 0.48 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 46 | 0.48 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 46 | 0.48 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 46 | 0.48 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 1 | 0.48 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 22 | 0.48 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 35 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 3 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 3 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 3 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 3 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 3 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 3 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 5 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 5 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 5 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 5 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 5 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 5 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 10 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 10 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 10 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 10 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 10 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 10 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 13 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 13 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 13 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 13 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 13 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 13 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 15 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 15 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 15 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 15 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 15 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 15 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 16 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 16 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 16 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 16 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 16 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 16 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 18 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 18 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 18 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 18 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 18 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 18 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 26 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 26 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 26 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 26 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 26 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 26 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 28 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 28 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 28 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 28 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 28 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 28 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 33 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 33 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 33 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 33 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 33 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 33 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 36 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 36 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 36 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 36 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 36 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 36 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 39 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 39 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 39 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 39 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 39 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 39 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 41 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 41 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 41 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 41 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 41 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 41 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 42 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 42 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 42 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 42 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 42 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 42 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 45 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 45 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 45 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 45 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 45 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 45 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 46 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 46 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 46 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 46 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 46 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 46 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 47 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 47 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 47 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 47 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 47 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 47 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 49 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 49 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 49 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 49 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 49 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 49 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 50 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 50 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 50 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 50 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 50 | 0.48 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 50 | 0.48 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 30 | 0.48 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 30 | 0.48 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 43 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 43 | 0.48 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 1 | 0.48 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 1 | 0.48 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 6 | 0.48 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 6 | 0.48 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 11 | 0.48 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 11 | 0.48 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 23 | 0.48 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 23 | 0.48 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 31 | 0.48 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 31 | 0.48 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 33 | 0.48 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 33 | 0.48 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 34 | 0.48 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 34 | 0.48 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 42 | 0.48 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 42 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 12 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 12 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 12 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 12 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 17 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 17 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 17 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 17 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 25 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 25 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 25 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 25 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 27 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 27 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 27 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 27 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 30 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 30 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 30 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 30 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 35 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 35 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 35 | 0.48 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 35 | 0.48 |
| (1,1013) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:2:SER:HB2 | 6 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1013) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:2:SER:HB2 | 6 | 0.48 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 32 | 0.48 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 32 | 0.48 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 32 | 0.48 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 32 | 0.48 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 32 | 0.48 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 32 | 0.48 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 42 | 0.48 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 42 | 0.48 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 42 | 0.48 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 42 | 0.48 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 42 | 0.48 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 42 | 0.48 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 49 | 0.47 |
| (2,926) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 30 | 0.47 |
| (2,926) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 43 | 0.47 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 2 | 0.47 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 19 | 0.47 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 46 | 0.47 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 7 | 0.47 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.47 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.47 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.47 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.47 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.47 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.47 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 5 | 0.47 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 27 | 0.47 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.47 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.47 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.47 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.47 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 33 | 0.47 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 33 | 0.47 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 33 | 0.47 |
| (2,814) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 21 | 0.47 |
| (2,814) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 25 | 0.47 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 34 | 0.47 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 8 | 0.47 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 17 | 0.47 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 27 | 0.47 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 20 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 20 | 0.47 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.47 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.47 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.47 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.47 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.47 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.47 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 33 | 0.47 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 33 | 0.47 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 33 | 0.47 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 5 | 0.47 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 5 | 0.47 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 5 | 0.47 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG21 | 1:A:12:GLN:HE22 | 11 | 0.47 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG22 | 1:A:12:GLN:HE22 | 11 | 0.47 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG23 | 1:A:12:GLN:HE22 | 11 | 0.47 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 21 | 0.47 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 21 | 0.47 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 21 | 0.47 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 25 | 0.47 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 25 | 0.47 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 25 | 0.47 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 28 | 0.47 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 28 | 0.47 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 28 | 0.47 |
| (2,601) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 5 | 0.47 |
| (2,601) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 31 | 0.47 |
| (2,582) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 45 | 0.47 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 5 | 0.47 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 5 | 0.47 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 5 | 0.47 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 34 | 0.47 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 20 | 0.47 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 20 | 0.47 |
| (2,462) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 21 | 0.47 |
| (2,462) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 25 | 0.47 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.47 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.47 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.47 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 21 | 0.47 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 21 | 0.47 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 21 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 25 | 0.47 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 25 | 0.47 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 25 | 0.47 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 28 | 0.47 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 28 | 0.47 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 28 | 0.47 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 8 | 0.47 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 17 | 0.47 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 27 | 0.47 |
| (2,315) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 45 | 0.47 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 2 | 0.47 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 19 | 0.47 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 46 | 0.47 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.47 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 7 | 0.47 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.47 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.47 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.47 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.47 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.47 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.47 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 5 | 0.47 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 27 | 0.47 |
| (2,186) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 5 | 0.47 |
| (2,186) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 31 | 0.47 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 49 | 0.47 |
| (2,156) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 30 | 0.47 |
| (2,156) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 43 | 0.47 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 8 | 0.47 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 12 | 0.47 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 14 | 0.47 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 18 | 0.47 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 25 | 0.47 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 27 | 0.47 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 28 | 0.47 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 42 | 0.47 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 47 | 0.47 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 49 | 0.47 |
| (1,900) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 30 | 0.47 |
| (1,900) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 43 | 0.47 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 2 | 0.47 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 19 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 46 | 0.47 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 7 | 0.47 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.47 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.47 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.47 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.47 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.47 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.47 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 5 | 0.47 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 27 | 0.47 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.47 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.47 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.47 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.47 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 33 | 0.47 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 33 | 0.47 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 33 | 0.47 |
| (1,789) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 21 | 0.47 |
| (1,789) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 25 | 0.47 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 8 | 0.47 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 17 | 0.47 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 27 | 0.47 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 20 | 0.47 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 20 | 0.47 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 21 | 0.47 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 36 | 0.47 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.47 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.47 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.47 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 21 | 0.47 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 21 | 0.47 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 21 | 0.47 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 25 | 0.47 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 25 | 0.47 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 25 | 0.47 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 28 | 0.47 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 28 | 0.47 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 28 | 0.47 |
| (1,584) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 5 | 0.47 |
| (1,584) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 31 | 0.47 |
| (1,566) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 45 | 0.47 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 5 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 5 | 0.47 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 5 | 0.47 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 34 | 0.47 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 46 | 0.47 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 6 | 0.47 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 19 | 0.47 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 36 | 0.47 |
| (1,262) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 45 | 0.47 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 41 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 2 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 2 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 3 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 3 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 8 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 8 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 16 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 16 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 18 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 18 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 26 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 26 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 27 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 27 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 29 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 29 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 33 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 33 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 34 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 34 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 37 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 37 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 39 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 39 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 44 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 44 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 45 | 0.47 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 45 | 0.47 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 8 | 0.47 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 8 | 0.47 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 15 | 0.47 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 15 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 4 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 4 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 4 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 4 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 4 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 4 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 4 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 4 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 4 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 22 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 22 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 22 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 22 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 22 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 22 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 22 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 22 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 22 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 27 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 27 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 27 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 27 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 27 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 27 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 27 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 27 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 27 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 29 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 29 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 29 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 29 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 29 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 29 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 29 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 29 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 29 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 40 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 40 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 40 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 40 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 40 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 40 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 40 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 40 | 0.47 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 40 | 0.47 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 23 | 0.47 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 23 | 0.47 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 23 | 0.47 |
| (1,1003) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 23 | 0.47 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 23 | 0.47 |
| (1,1003) | 1:A:7:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 23 | 0.47 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 30 | 0.46 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 31 | 0.46 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 46 | 0.46 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 40 | 0.46 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 3 | 0.46 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 6 | 0.46 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 9 | 0.46 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 18 | 0.46 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 38 | 0.46 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 18 | 0.46 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 25 | 0.46 |
| (2,865) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 25 | 0.46 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.46 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.46 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.46 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.46 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.46 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.46 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.46 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.46 |
| (2,850) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 38 | 0.46 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 1 | 0.46 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.46 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 12 | 0.46 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 12 | 0.46 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 12 | 0.46 |
| (2,807) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 44 | 0.46 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 26 | 0.46 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 38 | 0.46 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 42 | 0.46 |
| (2,794) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 5 | 0.46 |
| (2,79) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 20 | 0.46 |
| (2,79) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 20 | 0.46 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 50 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 20 | 0.46 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 39 | 0.46 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 18 | 0.46 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 18 | 0.46 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 25 | 0.46 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 25 | 0.46 |
| (2,702) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 5 | 0.46 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 12 | 0.46 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 12 | 0.46 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 12 | 0.46 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 3 | 0.46 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 3 | 0.46 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 3 | 0.46 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 36 | 0.46 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 36 | 0.46 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 36 | 0.46 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 18 | 0.46 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 37 | 0.46 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 37 | 0.46 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 37 | 0.46 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 41 | 0.46 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 41 | 0.46 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 41 | 0.46 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 46 | 0.46 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 46 | 0.46 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 46 | 0.46 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 30 | 0.46 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 31 | 0.46 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 46 | 0.46 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 26 | 0.46 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 34 | 0.46 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 16 | 0.46 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 16 | 0.46 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 16 | 0.46 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 41 | 0.46 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 41 | 0.46 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 41 | 0.46 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 21 | 0.46 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 21 | 0.46 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 21 | 0.46 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 37 | 0.46 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 37 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 37 | 0.46 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 27 | 0.46 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 7 | 0.46 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 15 | 0.46 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 16 | 0.46 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 18 | 0.46 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 25 | 0.46 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 35 | 0.46 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 41 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 1 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 2 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 3 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 5 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 6 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 7 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 8 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 13 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 14 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 17 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 19 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 20 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 23 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 24 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 26 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 28 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 29 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 32 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 33 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 34 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 35 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 36 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 37 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 38 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 39 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 40 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 41 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 42 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 44 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 45 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 46 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 48 | 0.46 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 49 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,507) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 8 | 0.46 |
| (2,5) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 38 | 0.46 |
| (2,479) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 20 | 0.46 |
| (2,479) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 20 | 0.46 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 50 | 0.46 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 18 | 0.46 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 18 | 0.46 |
| (2,461) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 5 | 0.46 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 27 | 0.46 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 40 | 0.46 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 7 | 0.46 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 15 | 0.46 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 16 | 0.46 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 18 | 0.46 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 25 | 0.46 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 35 | 0.46 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 41 | 0.46 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 41 | 0.46 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 41 | 0.46 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 41 | 0.46 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 46 | 0.46 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 46 | 0.46 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 46 | 0.46 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 26 | 0.46 |
| (2,390) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 5 | 0.46 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 26 | 0.46 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 38 | 0.46 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 42 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 1 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 2 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 3 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 5 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 6 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 7 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 8 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 13 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 14 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 17 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 19 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 20 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 23 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 24 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 26 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 28 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 29 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 32 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 33 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 34 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 35 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 36 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 37 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 38 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 39 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 40 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 41 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 42 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 44 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 45 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 46 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 48 | 0.46 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 49 | 0.46 |
| (2,377) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 44 | 0.46 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 20 | 0.46 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 39 | 0.46 |
| (2,354) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 8 | 0.46 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 3 | 0.46 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 6 | 0.46 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 9 | 0.46 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 18 | 0.46 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 38 | 0.46 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 25 | 0.46 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 25 | 0.46 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 25 | 0.46 |
| (2,261) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 25 | 0.46 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.46 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 18 | 0.46 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.46 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.46 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.46 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.46 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.46 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.46 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.46 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 1 | 0.46 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 18 | 0.46 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 34 | 0.46 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 14 | 0.46 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 14 | 0.46 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 4 | 0.46 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 6 | 0.46 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 10 | 0.46 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 13 | 0.46 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 18 | 0.46 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 18 | 0.46 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 40 | 0.46 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 3 | 0.46 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 6 | 0.46 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 9 | 0.46 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 18 | 0.46 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 38 | 0.46 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 18 | 0.46 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG2 | 25 | 0.46 |
| (1,839) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:19:PRO:HG3 | 25 | 0.46 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.46 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.46 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.46 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.46 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.46 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.46 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.46 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.46 |
| (1,824) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 38 | 0.46 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 1 | 0.46 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.46 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 12 | 0.46 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 12 | 0.46 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 12 | 0.46 |
| (1,782) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 44 | 0.46 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 26 | 0.46 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 38 | 0.46 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 42 | 0.46 |
| (1,769) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 5 | 0.46 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 20 | 0.46 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 39 | 0.46 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 18 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 18 | 0.46 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 25 | 0.46 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 25 | 0.46 |
| (1,678) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 5 | 0.46 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 14 | 0.46 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 45 | 0.46 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 18 | 0.46 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 41 | 0.46 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 41 | 0.46 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 41 | 0.46 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 46 | 0.46 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 46 | 0.46 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 46 | 0.46 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 30 | 0.46 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 31 | 0.46 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 46 | 0.46 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 26 | 0.46 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 34 | 0.46 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 37 | 0.46 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 37 | 0.46 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 37 | 0.46 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 27 | 0.46 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 7 | 0.46 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 15 | 0.46 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 16 | 0.46 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 18 | 0.46 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 25 | 0.46 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 35 | 0.46 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 41 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 1 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 2 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 3 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 5 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 6 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 7 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 8 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 13 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 14 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 17 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 19 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 20 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 23 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 24 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 26 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 28 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 29 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 32 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 33 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 34 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 35 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 36 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 37 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 38 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 39 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 40 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 41 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 42 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 44 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 45 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 46 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 48 | 0.46 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 49 | 0.46 |
| (1,497) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 8 | 0.46 |
| (1,469) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 20 | 0.46 |
| (1,469) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 20 | 0.46 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 50 | 0.46 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 47 | 0.46 |
| (1,312) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HB3 | 48 | 0.46 |
| (1,291) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:13:CYS:HB3 | 40 | 0.46 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 29 | 0.46 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 46 | 0.46 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 32 | 0.46 |
| (1,151) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB3 | 10 | 0.46 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 10 | 0.46 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 10 | 0.46 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 12 | 0.46 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 12 | 0.46 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 13 | 0.46 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 13 | 0.46 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 22 | 0.46 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 22 | 0.46 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 25 | 0.46 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 25 | 0.46 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 41 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 41 | 0.46 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 26 | 0.46 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 26 | 0.46 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 26 | 0.46 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 26 | 0.46 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 48 | 0.46 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 48 | 0.46 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 48 | 0.46 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 48 | 0.46 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 38 | 0.46 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 38 | 0.46 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 38 | 0.46 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 38 | 0.46 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 38 | 0.46 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 38 | 0.46 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 38 | 0.46 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 38 | 0.46 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 38 | 0.46 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 12 | 0.45 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 33 | 0.45 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 35 | 0.45 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 36 | 0.45 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 42 | 0.45 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 32 | 0.45 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 27 | 0.45 |
| (2,926) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 29 | 0.45 |
| (2,926) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 44 | 0.45 |
| (2,926) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 45 | 0.45 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 43 | 0.45 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 49 | 0.45 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 38 | 0.45 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 47 | 0.45 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.45 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.45 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.45 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.45 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.45 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.45 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.45 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.45 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.45 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.45 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.45 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.45 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.45 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.45 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.45 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 18 | 0.45 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 18 | 0.45 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.45 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.45 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.45 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 11 | 0.45 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 11 | 0.45 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 11 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 1 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 2 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 3 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 4 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 5 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 6 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 7 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 8 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 9 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 10 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 11 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 12 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 13 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 14 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 15 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 16 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 17 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 18 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 19 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 20 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 21 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 22 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 23 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 24 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 25 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 26 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 27 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 28 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 29 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 30 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 31 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 32 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 33 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 35 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 36 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 37 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 38 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 39 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 40 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 41 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 42 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 43 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 44 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 45 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 46 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 47 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 48 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 49 | 0.45 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 50 | 0.45 |
| (2,794) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 47 | 0.45 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 7 | 0.45 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 22 | 0.45 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 42 | 0.45 |
| (2,733) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 26 | 0.45 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 45 | 0.45 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 45 | 0.45 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 27 | 0.45 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 27 | 0.45 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 34 | 0.45 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 34 | 0.45 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 11 | 0.45 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 11 | 0.45 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 11 | 0.45 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 18 | 0.45 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 18 | 0.45 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 18 | 0.45 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 46 | 0.45 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 46 | 0.45 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 46 | 0.45 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 4 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 4 | 0.45 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 6 | 0.45 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 6 | 0.45 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 6 | 0.45 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 15 | 0.45 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 15 | 0.45 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 15 | 0.45 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 32 | 0.45 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 32 | 0.45 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 32 | 0.45 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 34 | 0.45 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 34 | 0.45 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 34 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 1 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 2 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 3 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 4 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 5 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 6 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 7 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 8 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 9 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 10 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 11 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 12 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 13 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 14 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 15 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 16 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 17 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 18 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 19 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 20 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 21 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 22 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 23 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 24 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 25 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 26 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 27 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 28 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 29 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 30 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 31 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 32 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 33 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 35 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 36 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 37 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 38 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 39 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 40 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 41 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 42 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 43 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 44 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 45 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 46 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 47 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 48 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 49 | 0.45 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 50 | 0.45 |
| (2,601) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 23 | 0.45 |
| (2,601) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 28 | 0.45 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 19 | 0.45 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 17 | 0.45 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 17 | 0.45 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 17 | 0.45 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 24 | 0.45 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 24 | 0.45 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 27 | 0.45 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 27 | 0.45 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 28 | 0.45 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 4 | 0.45 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 9 | 0.45 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 10 | 0.45 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 11 | 0.45 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 12 | 0.45 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 15 | 0.45 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 16 | 0.45 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 18 | 0.45 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 21 | 0.45 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 22 | 0.45 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 25 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 27 | 0.45 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 30 | 0.45 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 31 | 0.45 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 43 | 0.45 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 47 | 0.45 |
| (2,511) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 50 | 0.45 |
| (2,507) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 14 | 0.45 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 7 | 0.45 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 22 | 0.45 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 42 | 0.45 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 45 | 0.45 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 45 | 0.45 |
| (2,461) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 47 | 0.45 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 27 | 0.45 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 28 | 0.45 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 6 | 0.45 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 6 | 0.45 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 6 | 0.45 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 15 | 0.45 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 15 | 0.45 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 15 | 0.45 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 32 | 0.45 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 32 | 0.45 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 32 | 0.45 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 34 | 0.45 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 34 | 0.45 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 34 | 0.45 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 4 | 0.45 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 9 | 0.45 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 10 | 0.45 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 11 | 0.45 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 12 | 0.45 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 15 | 0.45 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 16 | 0.45 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 18 | 0.45 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 21 | 0.45 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 22 | 0.45 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 25 | 0.45 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 27 | 0.45 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 30 | 0.45 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 31 | 0.45 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 43 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 47 | 0.45 |
| (2,380) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 50 | 0.45 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 4 | 0.45 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 4 | 0.45 |
| (2,354) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 14 | 0.45 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 18 | 0.45 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 18 | 0.45 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 18 | 0.45 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 46 | 0.45 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 46 | 0.45 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 46 | 0.45 |
| (2,323) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 26 | 0.45 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 43 | 0.45 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 49 | 0.45 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 27 | 0.45 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 27 | 0.45 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 34 | 0.45 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 34 | 0.45 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 18 | 0.45 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 18 | 0.45 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.45 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.45 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.45 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 38 | 0.45 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 47 | 0.45 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.45 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.45 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.45 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.45 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.45 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.45 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.45 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.45 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.45 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.45 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.45 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.45 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.45 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.45 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.45 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.45 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 19 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,186) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 23 | 0.45 |
| (2,186) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 28 | 0.45 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 12 | 0.45 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 33 | 0.45 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 35 | 0.45 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 36 | 0.45 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 42 | 0.45 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 32 | 0.45 |
| (2,156) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 29 | 0.45 |
| (2,156) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 44 | 0.45 |
| (2,156) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 45 | 0.45 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 24 | 0.45 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 24 | 0.45 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 27 | 0.45 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 27 | 0.45 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 32 | 0.45 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 32 | 0.45 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 46 | 0.45 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 46 | 0.45 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 2 | 0.45 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 16 | 0.45 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 23 | 0.45 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 29 | 0.45 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 30 | 0.45 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 32 | 0.45 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 44 | 0.45 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 46 | 0.45 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 48 | 0.45 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 12 | 0.45 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 33 | 0.45 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 35 | 0.45 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 36 | 0.45 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 42 | 0.45 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 32 | 0.45 |
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 27 | 0.45 |
| (1,900) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 29 | 0.45 |
| (1,900) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 44 | 0.45 |
| (1,900) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 45 | 0.45 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 43 | 0.45 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 49 | 0.45 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 38 | 0.45 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 47 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.45 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.45 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.45 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.45 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.45 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.45 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.45 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.45 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.45 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.45 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.45 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.45 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.45 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.45 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.45 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.45 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 18 | 0.45 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 18 | 0.45 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.45 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.45 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.45 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 11 | 0.45 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 11 | 0.45 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 11 | 0.45 |
| (1,769) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 47 | 0.45 |
| (1,709) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 26 | 0.45 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 45 | 0.45 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 45 | 0.45 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 27 | 0.45 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 27 | 0.45 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 34 | 0.45 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 34 | 0.45 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 15 | 0.45 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 29 | 0.45 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 50 | 0.45 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 18 | 0.45 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 18 | 0.45 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 18 | 0.45 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 46 | 0.45 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 46 | 0.45 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 46 | 0.45 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 4 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 4 | 0.45 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 6 | 0.45 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 6 | 0.45 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 6 | 0.45 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 15 | 0.45 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 15 | 0.45 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 15 | 0.45 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 32 | 0.45 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 32 | 0.45 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 32 | 0.45 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 34 | 0.45 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 34 | 0.45 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 34 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 1 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 2 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 3 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 4 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 5 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 6 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 7 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 8 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 9 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 10 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 11 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 12 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 13 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 14 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 15 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 16 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 17 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 18 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 19 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 20 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 21 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 22 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 23 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 24 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 25 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 26 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 27 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 28 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 29 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 30 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 31 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 32 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 33 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 35 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 36 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 37 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 38 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 39 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 40 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 41 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 42 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 43 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 44 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 45 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 46 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 47 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 48 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 49 | 0.45 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 50 | 0.45 |
| (1,584) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 23 | 0.45 |
| (1,584) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 28 | 0.45 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 19 | 0.45 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 24 | 0.45 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 24 | 0.45 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 27 | 0.45 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 27 | 0.45 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 28 | 0.45 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 4 | 0.45 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 9 | 0.45 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 10 | 0.45 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 11 | 0.45 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 12 | 0.45 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 15 | 0.45 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 16 | 0.45 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 18 | 0.45 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 21 | 0.45 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 22 | 0.45 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 25 | 0.45 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 27 | 0.45 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 30 | 0.45 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 31 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 43 | 0.45 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 47 | 0.45 |
| (1,501) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 50 | 0.45 |
| (1,497) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 14 | 0.45 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 7 | 0.45 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 22 | 0.45 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 42 | 0.45 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 26 | 0.45 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 26 | 0.45 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 14 | 0.45 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 28 | 0.45 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 29 | 0.45 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 23 | 0.45 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 23 | 0.45 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 23 | 0.45 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 23 | 0.45 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 23 | 0.45 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 23 | 0.45 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 7 | 0.45 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 7 | 0.45 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 7 | 0.45 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 7 | 0.45 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 7 | 0.45 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 7 | 0.45 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 7 | 0.45 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 7 | 0.45 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 7 | 0.45 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 10 | 0.45 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 10 | 0.45 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 15 | 0.45 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 15 | 0.45 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 48 | 0.45 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 48 | 0.45 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 42 | 0.45 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 42 | 0.45 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 42 | 0.45 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 42 | 0.45 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 42 | 0.45 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 42 | 0.45 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 48 | 0.45 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 48 | 0.45 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 48 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 48 | 0.45 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 48 | 0.45 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 48 | 0.45 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:HA | 18 | 0.45 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:HA | 18 | 0.45 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 1 | 0.44 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 3 | 0.44 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 6 | 0.44 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 7 | 0.44 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 23 | 0.44 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 24 | 0.44 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 25 | 0.44 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 27 | 0.44 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 32 | 0.44 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 50 | 0.44 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 46 | 0.44 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 21 | 0.44 |
| (2,926) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 3 | 0.44 |
| (2,926) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 33 | 0.44 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 33 | 0.44 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 10 | 0.44 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 12 | 0.44 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 22 | 0.44 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 30 | 0.44 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 34 | 0.44 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 1 | 0.44 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 1 | 0.44 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 1 | 0.44 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 24 | 0.44 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 24 | 0.44 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 24 | 0.44 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 38 | 0.44 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 38 | 0.44 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 38 | 0.44 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 40 | 0.44 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 40 | 0.44 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 40 | 0.44 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 41 | 0.44 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 41 | 0.44 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 41 | 0.44 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.44 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.44 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.44 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 5 | 0.44 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 5 | 0.44 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.44 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.44 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.44 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.44 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.44 |
| (2,814) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 20 | 0.44 |
| (2,814) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 46 | 0.44 |
| (2,80) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 34 | 0.44 |
| (2,797) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 46 | 0.44 |
| (2,794) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 22 | 0.44 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 8 | 0.44 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 20 | 0.44 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 28 | 0.44 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 31 | 0.44 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 49 | 0.44 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.44 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 42 | 0.44 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 11 | 0.44 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 13 | 0.44 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 24 | 0.44 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 28 | 0.44 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 49 | 0.44 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 5 | 0.44 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 5 | 0.44 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 10 | 0.44 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 10 | 0.44 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.44 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.44 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.44 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.44 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.44 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.44 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 4 | 0.44 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 4 | 0.44 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 4 | 0.44 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 3 | 0.44 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 1 | 0.44 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 1 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 1 | 0.44 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 7 | 0.44 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 7 | 0.44 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 7 | 0.44 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 11 | 0.44 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 11 | 0.44 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 11 | 0.44 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 19 | 0.44 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 19 | 0.44 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 19 | 0.44 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 24 | 0.44 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 24 | 0.44 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 24 | 0.44 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 29 | 0.44 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 29 | 0.44 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 29 | 0.44 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 1 | 0.44 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 3 | 0.44 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 6 | 0.44 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 7 | 0.44 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 23 | 0.44 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 24 | 0.44 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 25 | 0.44 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 27 | 0.44 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 32 | 0.44 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 50 | 0.44 |
| (2,631) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 39 | 0.44 |
| (2,610) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 34 | 0.44 |
| (2,601) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 18 | 0.44 |
| (2,601) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 37 | 0.44 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 2 | 0.44 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 4 | 0.44 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 10 | 0.44 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 15 | 0.44 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 32 | 0.44 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 33 | 0.44 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 41 | 0.44 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 42 | 0.44 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 49 | 0.44 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 9 | 0.44 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 9 | 0.44 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 9 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 16 | 0.44 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 16 | 0.44 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 16 | 0.44 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 7 | 0.44 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 7 | 0.44 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 8 | 0.44 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 8 | 0.44 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 13 | 0.44 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 4 | 0.44 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 14 | 0.44 |
| (2,522) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 42 | 0.44 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 8 | 0.44 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 20 | 0.44 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 28 | 0.44 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 31 | 0.44 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 49 | 0.44 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 5 | 0.44 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 5 | 0.44 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 10 | 0.44 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 10 | 0.44 |
| (2,462) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 20 | 0.44 |
| (2,462) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 46 | 0.44 |
| (2,461) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 22 | 0.44 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 8 | 0.44 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 8 | 0.44 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 13 | 0.44 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 4 | 0.44 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 14 | 0.44 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.44 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.44 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.44 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 1 | 0.44 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 1 | 0.44 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 1 | 0.44 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 7 | 0.44 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 7 | 0.44 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 7 | 0.44 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 11 | 0.44 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 11 | 0.44 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 11 | 0.44 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 19 | 0.44 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 19 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 19 | 0.44 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 24 | 0.44 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 24 | 0.44 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 24 | 0.44 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 29 | 0.44 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 29 | 0.44 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 29 | 0.44 |
| (2,428) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 39 | 0.44 |
| (2,420) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 42 | 0.44 |
| (2,381) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 46 | 0.44 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 1 | 0.44 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 1 | 0.44 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 1 | 0.44 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 24 | 0.44 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 24 | 0.44 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 24 | 0.44 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 38 | 0.44 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 38 | 0.44 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 38 | 0.44 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 40 | 0.44 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 40 | 0.44 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 40 | 0.44 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 41 | 0.44 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 41 | 0.44 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 41 | 0.44 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 11 | 0.44 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 13 | 0.44 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 24 | 0.44 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 28 | 0.44 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 49 | 0.44 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.44 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 42 | 0.44 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 4 | 0.44 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 4 | 0.44 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 4 | 0.44 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 33 | 0.44 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 5 | 0.44 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 5 | 0.44 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.44 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.44 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 10 | 0.44 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 12 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 22 | 0.44 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 30 | 0.44 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 34 | 0.44 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.44 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.44 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.44 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.44 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 3 | 0.44 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 2 | 0.44 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 4 | 0.44 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 10 | 0.44 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 15 | 0.44 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 32 | 0.44 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 33 | 0.44 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 41 | 0.44 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 42 | 0.44 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 49 | 0.44 |
| (2,186) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 18 | 0.44 |
| (2,186) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 37 | 0.44 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 46 | 0.44 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 21 | 0.44 |
| (2,156) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 3 | 0.44 |
| (2,156) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 33 | 0.44 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 7 | 0.44 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 7 | 0.44 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:H | 13 | 0.44 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:H | 13 | 0.44 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 4 | 0.44 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 4 | 0.44 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 21 | 0.44 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 21 | 0.44 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 34 | 0.44 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 34 | 0.44 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 3 | 0.44 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 7 | 0.44 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 11 | 0.44 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 17 | 0.44 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 20 | 0.44 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 41 | 0.44 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 45 | 0.44 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 50 | 0.44 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 46 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 21 | 0.44 |
| (1,900) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 3 | 0.44 |
| (1,900) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 33 | 0.44 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 33 | 0.44 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 10 | 0.44 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 12 | 0.44 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 22 | 0.44 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 30 | 0.44 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 34 | 0.44 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 1 | 0.44 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 1 | 0.44 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 1 | 0.44 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 24 | 0.44 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 24 | 0.44 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 24 | 0.44 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 38 | 0.44 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 38 | 0.44 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 38 | 0.44 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 40 | 0.44 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 40 | 0.44 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 40 | 0.44 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 41 | 0.44 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 41 | 0.44 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 41 | 0.44 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.44 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.44 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.44 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.44 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 5 | 0.44 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 5 | 0.44 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.44 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.44 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 43 | 0.44 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 43 | 0.44 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.44 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.44 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.44 |
| (1,789) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 20 | 0.44 |
| (1,789) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 46 | 0.44 |
| (1,772) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 46 | 0.44 |
| (1,769) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 22 | 0.44 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 42 | 0.44 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 11 | 0.44 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 13 | 0.44 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 24 | 0.44 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 28 | 0.44 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 49 | 0.44 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 5 | 0.44 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 5 | 0.44 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 10 | 0.44 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 10 | 0.44 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 9 | 0.44 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 31 | 0.44 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 39 | 0.44 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.44 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.44 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.44 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 4 | 0.44 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 4 | 0.44 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 4 | 0.44 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 3 | 0.44 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 1 | 0.44 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 1 | 0.44 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 1 | 0.44 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 7 | 0.44 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 7 | 0.44 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 7 | 0.44 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 11 | 0.44 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 11 | 0.44 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 11 | 0.44 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 19 | 0.44 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 19 | 0.44 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 19 | 0.44 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 24 | 0.44 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 24 | 0.44 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 24 | 0.44 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 29 | 0.44 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 29 | 0.44 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 29 | 0.44 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 1 | 0.44 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 3 | 0.44 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 6 | 0.44 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 7 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 23 | 0.44 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 24 | 0.44 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 25 | 0.44 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 27 | 0.44 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 32 | 0.44 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 50 | 0.44 |
| (1,612) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 39 | 0.44 |
| (1,593) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HG3 | 34 | 0.44 |
| (1,584) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 18 | 0.44 |
| (1,584) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 37 | 0.44 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 2 | 0.44 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 4 | 0.44 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 10 | 0.44 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 15 | 0.44 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 32 | 0.44 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 33 | 0.44 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 41 | 0.44 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 42 | 0.44 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 49 | 0.44 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 7 | 0.44 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 7 | 0.44 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 8 | 0.44 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 8 | 0.44 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 13 | 0.44 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 4 | 0.44 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 14 | 0.44 |
| (1,512) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 42 | 0.44 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 8 | 0.44 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 20 | 0.44 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 28 | 0.44 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 31 | 0.44 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 49 | 0.44 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 1 | 0.44 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 1 | 0.44 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 34 | 0.44 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 34 | 0.44 |
| (1,291) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:13:CYS:HB3 | 5 | 0.44 |
| (1,291) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:13:CYS:HB3 | 7 | 0.44 |
| (1,291) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:13:CYS:HB3 | 13 | 0.44 |
| (1,291) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:13:CYS:HB3 | 37 | 0.44 |
| (1,262) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 13 | 0.44 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 13 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 33 | 0.44 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 19 | 0.44 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 41 | 0.44 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 41 | 0.44 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 41 | 0.44 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 18 | 0.44 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 18 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 1 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 1 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 4 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 4 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 5 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 5 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 6 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 6 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 7 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 7 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 9 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 9 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 11 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 11 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 12 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 12 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 13 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 13 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 14 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 14 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 17 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 17 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 19 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 19 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 20 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 20 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 21 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 21 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 22 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 22 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 23 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 23 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 24 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 24 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 25 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 25 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 28 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 28 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 31 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 31 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 32 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 32 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 35 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 35 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 36 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 36 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 38 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 38 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 40 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 40 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 41 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 41 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 42 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 42 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 46 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 46 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 47 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 47 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 48 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 48 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 49 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 49 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 50 | 0.44 |
| (1,1029) | 1:A:11:GLU:HG2 | 1:A:11:GLU:HG3 | 50 | 0.44 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 3 | 0.44 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 3 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 2 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 2 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 2 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 2 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 2 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 2 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 19 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 19 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 19 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 19 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 19 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 19 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 24 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 24 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 24 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 24 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 24 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 24 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 34 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 34 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 34 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 34 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 34 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 34 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 38 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 38 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 38 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 38 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 38 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 38 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 47 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 47 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 47 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 47 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 47 | 0.44 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 47 | 0.44 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 14 | 0.44 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 14 | 0.44 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 14 | 0.44 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 14 | 0.44 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 18 | 0.44 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 18 | 0.44 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 18 | 0.44 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 18 | 0.44 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 20 | 0.44 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 20 | 0.44 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 20 | 0.44 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 20 | 0.44 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 37 | 0.44 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 37 | 0.44 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 37 | 0.44 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 37 | 0.44 |
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:HE21 | 45 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:HE21 | 45 | 0.44 |
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 45 | 0.44 |
| (1,1009) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 45 | 0.44 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 14 | 0.43 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 23 | 0.43 |
| (2,926) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 16 | 0.43 |
| (2,926) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 27 | 0.43 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 7 | 0.43 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 26 | 0.43 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 47 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 2 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 4 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 6 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 14 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 16 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 17 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 19 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 21 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 25 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 26 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 32 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 35 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 36 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 39 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 41 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 43 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 44 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 49 | 0.43 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 50 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 4 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 4 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 4 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 13 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 13 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 13 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 18 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 18 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 18 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 23 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 23 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 23 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 25 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 25 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 25 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 28 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 28 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 28 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 32 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 32 | 0.43 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 32 | 0.43 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.43 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.43 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.43 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 33 | 0.43 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 35 | 0.43 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.43 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.43 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.43 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.43 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.43 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.43 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 4 | 0.43 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 16 | 0.43 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 30 | 0.43 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 35 | 0.43 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 36 | 0.43 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 39 | 0.43 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 44 | 0.43 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.43 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 2 | 0.43 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 10 | 0.43 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 15 | 0.43 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 18 | 0.43 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 36 | 0.43 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 40 | 0.43 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 16 | 0.43 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 16 | 0.43 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 23 | 0.43 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 23 | 0.43 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 49 | 0.43 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 49 | 0.43 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 23 | 0.43 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.43 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.43 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.43 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.43 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.43 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 47 | 0.43 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 47 | 0.43 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 47 | 0.43 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 33 | 0.43 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 33 | 0.43 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 33 | 0.43 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 23 | 0.43 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 28 | 0.43 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 12 | 0.43 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 12 | 0.43 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 12 | 0.43 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 14 | 0.43 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 14 | 0.43 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 14 | 0.43 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 17 | 0.43 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 17 | 0.43 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 17 | 0.43 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 47 | 0.43 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 47 | 0.43 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 47 | 0.43 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 48 | 0.43 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 48 | 0.43 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 48 | 0.43 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 5 | 0.43 |
| (2,601) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 3 | 0.43 |
| (2,601) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 7 | 0.43 |
| (2,601) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 13 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 3 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 6 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 9 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 11 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 12 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 13 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 14 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 16 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 18 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 20 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 21 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 22 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 23 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 24 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 25 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 26 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 27 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 28 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 30 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 31 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 35 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 36 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 38 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 39 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 40 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 43 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 45 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 48 | 0.43 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 50 | 0.43 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 20 | 0.43 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 20 | 0.43 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 20 | 0.43 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 33 | 0.43 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 33 | 0.43 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 33 | 0.43 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 15 | 0.43 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 15 | 0.43 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 23 | 0.43 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 45 | 0.43 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 47 | 0.43 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 49 | 0.43 |
| (2,522) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 4 | 0.43 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 4 | 0.43 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 16 | 0.43 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 30 | 0.43 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 35 | 0.43 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 36 | 0.43 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 39 | 0.43 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 44 | 0.43 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 16 | 0.43 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 16 | 0.43 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 23 | 0.43 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 23 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 49 | 0.43 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 49 | 0.43 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 15 | 0.43 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 15 | 0.43 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.43 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 23 | 0.43 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 45 | 0.43 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 47 | 0.43 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 49 | 0.43 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.43 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.43 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.43 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 12 | 0.43 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 12 | 0.43 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 12 | 0.43 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 14 | 0.43 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 14 | 0.43 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 14 | 0.43 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 17 | 0.43 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 17 | 0.43 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 17 | 0.43 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 47 | 0.43 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 47 | 0.43 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 47 | 0.43 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 48 | 0.43 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 48 | 0.43 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 48 | 0.43 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 5 | 0.43 |
| (2,420) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 4 | 0.43 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 23 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 4 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 4 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 4 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 13 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 13 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 13 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 18 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 18 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 18 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 23 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 23 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 23 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 25 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 25 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 25 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 28 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 28 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 28 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 32 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 32 | 0.43 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 32 | 0.43 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 2 | 0.43 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 10 | 0.43 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 15 | 0.43 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 18 | 0.43 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 36 | 0.43 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 40 | 0.43 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 7 | 0.43 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 26 | 0.43 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 47 | 0.43 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.43 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.43 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 2 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 4 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 6 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 14 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 16 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 17 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 19 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 21 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 25 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 26 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 32 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 35 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 36 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 39 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 41 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 43 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 44 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 49 | 0.43 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 50 | 0.43 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.43 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.43 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 33 | 0.43 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 35 | 0.43 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 23 | 0.43 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 28 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 3 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 6 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 9 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 11 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 12 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 13 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 14 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 16 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 18 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 20 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 21 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 22 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 23 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 24 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 25 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 26 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 27 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 28 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 30 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 31 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 35 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 36 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 38 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 39 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 40 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 43 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 45 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 48 | 0.43 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 50 | 0.43 |
| (2,186) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 3 | 0.43 |
| (2,186) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 7 | 0.43 |
| (2,186) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 13 | 0.43 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 14 | 0.43 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 23 | 0.43 |
| (2,156) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 16 | 0.43 |
| (2,156) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 27 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 7 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 7 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 14 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 14 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 16 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 16 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 20 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 20 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 23 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 23 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 25 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 25 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 29 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 29 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 35 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 35 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 39 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 39 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 41 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 41 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 45 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 45 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 48 | 0.43 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 48 | 0.43 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 8 | 0.43 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 8 | 0.43 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 1 | 0.43 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 21 | 0.43 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 31 | 0.43 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 34 | 0.43 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 35 | 0.43 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 36 | 0.43 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 39 | 0.43 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 43 | 0.43 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 14 | 0.43 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 23 | 0.43 |
| (1,900) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 16 | 0.43 |
| (1,900) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 27 | 0.43 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 7 | 0.43 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 26 | 0.43 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 47 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 2 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 4 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 6 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 14 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 16 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 17 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 19 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 21 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 25 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 26 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 32 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 35 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 36 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 39 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 41 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 43 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 44 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 49 | 0.43 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 50 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 4 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 4 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 4 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 13 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 13 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 13 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 18 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 18 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 18 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 23 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 23 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 23 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 25 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 25 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 25 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 28 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 28 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 28 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 32 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 32 | 0.43 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 32 | 0.43 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.43 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.43 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.43 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 33 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 35 | 0.43 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.43 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.43 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.43 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.43 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.43 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.43 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.43 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 2 | 0.43 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 10 | 0.43 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 15 | 0.43 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 18 | 0.43 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 36 | 0.43 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 40 | 0.43 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 16 | 0.43 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 16 | 0.43 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 23 | 0.43 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 23 | 0.43 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 49 | 0.43 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 49 | 0.43 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 23 | 0.43 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 20 | 0.43 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.43 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.43 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.43 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 23 | 0.43 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 28 | 0.43 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 12 | 0.43 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 12 | 0.43 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 12 | 0.43 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 14 | 0.43 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 14 | 0.43 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 14 | 0.43 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 17 | 0.43 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 17 | 0.43 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 17 | 0.43 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 47 | 0.43 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 47 | 0.43 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 47 | 0.43 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 48 | 0.43 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 48 | 0.43 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 48 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 5 | 0.43 |
| (1,584) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 3 | 0.43 |
| (1,584) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 7 | 0.43 |
| (1,584) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 13 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 3 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 6 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 9 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 11 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 12 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 13 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 14 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 16 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 18 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 20 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 21 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 22 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 23 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 24 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 25 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 26 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 27 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 28 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 30 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 31 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 35 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 36 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 38 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 39 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 40 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 43 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 45 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 48 | 0.43 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 50 | 0.43 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 33 | 0.43 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 33 | 0.43 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 33 | 0.43 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 15 | 0.43 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 15 | 0.43 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 23 | 0.43 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 45 | 0.43 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 47 | 0.43 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 49 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,512) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 4 | 0.43 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 4 | 0.43 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 16 | 0.43 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 30 | 0.43 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 35 | 0.43 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 36 | 0.43 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 39 | 0.43 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 44 | 0.43 |
| (1,291) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:13:CYS:HB3 | 3 | 0.43 |
| (1,291) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:13:CYS:HB3 | 18 | 0.43 |
| (1,291) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:13:CYS:HB3 | 23 | 0.43 |
| (1,291) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:13:CYS:HB3 | 31 | 0.43 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 38 | 0.43 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 4 | 0.43 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 24 | 0.43 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 43 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 2 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 2 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 2 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 2 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 2 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 2 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 2 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 2 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 2 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 4 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 4 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 4 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 4 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 4 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 4 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 4 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 4 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 4 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 9 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 9 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 9 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 9 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 9 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 9 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 9 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 9 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 9 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 21 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 21 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 21 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 21 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 21 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 21 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 21 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 21 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 21 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 37 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 37 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 37 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 37 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 37 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 37 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 37 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 37 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 37 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 38 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 38 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 38 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 38 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 38 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 38 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 38 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 38 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 38 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 42 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 42 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 42 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 42 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 42 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 42 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 42 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 42 | 0.43 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 42 | 0.43 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 29 | 0.43 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 29 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 4 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 4 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 4 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 4 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 4 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 4 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 10 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 10 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 10 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 10 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 10 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 10 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 15 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 15 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 15 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 15 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 15 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 15 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 22 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 22 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 22 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 22 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 22 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 22 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 28 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 28 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 28 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 28 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 28 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 28 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 37 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 37 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 37 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 37 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 37 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 37 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 39 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 39 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 39 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 39 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 39 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 39 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 44 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 44 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 44 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 44 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 44 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 44 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 45 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 45 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 45 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 45 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 45 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 45 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 46 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 46 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 46 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 46 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 46 | 0.43 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 46 | 0.43 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 5 | 0.42 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 9 | 0.42 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 14 | 0.42 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 17 | 0.42 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 18 | 0.42 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 20 | 0.42 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 22 | 0.42 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 28 | 0.42 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 29 | 0.42 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 37 | 0.42 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 42 | 0.42 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 47 | 0.42 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 6 | 0.42 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 40 | 0.42 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 8 | 0.42 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 9 | 0.42 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 11 | 0.42 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 20 | 0.42 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 23 | 0.42 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 27 | 0.42 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 28 | 0.42 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 29 | 0.42 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 33 | 0.42 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 42 | 0.42 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 45 | 0.42 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 48 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 11 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 11 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 11 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 14 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 14 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 14 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 19 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 19 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 19 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 22 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 22 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 22 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 31 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 31 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 31 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 36 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 36 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 36 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 42 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 42 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 42 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 48 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 48 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 48 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 50 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 50 | 0.42 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 50 | 0.42 |
| (2,853) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 37 | 0.42 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.42 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.42 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.42 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.42 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.42 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 43 | 0.42 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 43 | 0.42 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 43 | 0.42 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.42 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.42 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.42 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 2 | 0.42 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 3 | 0.42 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 5 | 0.42 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 14 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 18 | 0.42 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 21 | 0.42 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 24 | 0.42 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 32 | 0.42 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 34 | 0.42 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 46 | 0.42 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 47 | 0.42 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 6 | 0.42 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 17 | 0.42 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 23 | 0.42 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 31 | 0.42 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 32 | 0.42 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 42 | 0.42 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 50 | 0.42 |
| (2,733) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 39 | 0.42 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 23 | 0.42 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 23 | 0.42 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 26 | 0.42 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 26 | 0.42 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 37 | 0.42 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 37 | 0.42 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.42 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.42 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.42 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 43 | 0.42 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 43 | 0.42 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 43 | 0.42 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.42 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.42 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.42 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 34 | 0.42 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 34 | 0.42 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 34 | 0.42 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 38 | 0.42 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 38 | 0.42 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 38 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 2 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 2 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 2 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 3 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 3 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 3 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 8 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 8 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 8 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 13 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 13 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 13 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 16 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 16 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 16 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 22 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 22 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 22 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 31 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 31 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 31 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 35 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 35 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 35 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 36 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 36 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 36 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 38 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 38 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 38 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 44 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 44 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 44 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 50 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 50 | 0.42 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 50 | 0.42 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 5 | 0.42 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 9 | 0.42 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 14 | 0.42 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 17 | 0.42 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 18 | 0.42 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 20 | 0.42 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 22 | 0.42 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 28 | 0.42 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 29 | 0.42 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 37 | 0.42 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 42 | 0.42 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 47 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 1 | 0.42 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 5 | 0.42 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 8 | 0.42 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 17 | 0.42 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 29 | 0.42 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 37 | 0.42 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 44 | 0.42 |
| (2,590) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 46 | 0.42 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 21 | 0.42 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 21 | 0.42 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 21 | 0.42 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 36 | 0.42 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 36 | 0.42 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 36 | 0.42 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 12 | 0.42 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 12 | 0.42 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 12 | 0.42 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 36 | 0.42 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 36 | 0.42 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 36 | 0.42 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 39 | 0.42 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 39 | 0.42 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 39 | 0.42 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 40 | 0.42 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 40 | 0.42 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 40 | 0.42 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 38 | 0.42 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 38 | 0.42 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 38 | 0.42 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 22 | 0.42 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 22 | 0.42 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 10 | 0.42 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 5 | 0.42 |
| (2,522) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 49 | 0.42 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 2 | 0.42 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 3 | 0.42 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 5 | 0.42 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 14 | 0.42 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 18 | 0.42 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 21 | 0.42 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 24 | 0.42 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 32 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 34 | 0.42 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 46 | 0.42 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 47 | 0.42 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 22 | 0.42 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 22 | 0.42 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 10 | 0.42 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 6 | 0.42 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 5 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 2 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 2 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 2 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 3 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 3 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 3 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 8 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 8 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 8 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 13 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 13 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 13 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 16 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 16 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 16 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 22 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 22 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 22 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 31 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 31 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 31 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 35 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 35 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 35 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 36 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 36 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 36 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 38 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 38 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 38 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 44 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 44 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 44 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 50 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 50 | 0.42 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 50 | 0.42 |
| (2,420) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 49 | 0.42 |
| (2,416) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 37 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 11 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 11 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 11 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 14 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 14 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 14 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 19 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 19 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 19 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 22 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 22 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 22 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 31 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 31 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 31 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 36 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 36 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 36 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 42 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 42 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 42 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 48 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 48 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 48 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 50 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 50 | 0.42 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 50 | 0.42 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 17 | 0.42 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 23 | 0.42 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 31 | 0.42 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 32 | 0.42 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 42 | 0.42 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 50 | 0.42 |
| (2,323) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 39 | 0.42 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 40 | 0.42 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 23 | 0.42 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 23 | 0.42 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 26 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 26 | 0.42 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 37 | 0.42 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 37 | 0.42 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.42 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.42 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 8 | 0.42 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 9 | 0.42 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 11 | 0.42 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 20 | 0.42 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 23 | 0.42 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 27 | 0.42 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 28 | 0.42 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 29 | 0.42 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 33 | 0.42 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 42 | 0.42 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 45 | 0.42 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 48 | 0.42 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 1 | 0.42 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 5 | 0.42 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 8 | 0.42 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 17 | 0.42 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 29 | 0.42 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 37 | 0.42 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 44 | 0.42 |
| (2,19) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 46 | 0.42 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 6 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 4 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 4 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 4 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 4 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 4 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 4 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 4 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 4 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 4 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 22 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 22 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 22 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 22 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 22 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 22 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 22 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 22 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 22 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 27 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 27 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 27 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 27 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 27 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 27 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 27 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 27 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 27 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 29 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 29 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 29 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 29 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 29 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 29 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 29 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 29 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 29 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 40 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 40 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 40 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 40 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 40 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 40 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 40 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 40 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 40 | 0.42 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 19 | 0.42 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 22 | 0.42 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 26 | 0.42 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 33 | 0.42 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 49 | 0.42 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 6 | 0.42 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 40 | 0.42 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 8 | 0.42 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 9 | 0.42 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 11 | 0.42 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 20 | 0.42 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 23 | 0.42 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 27 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 28 | 0.42 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 29 | 0.42 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 33 | 0.42 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 42 | 0.42 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 45 | 0.42 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 48 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 11 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 11 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 11 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 14 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 14 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 14 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 19 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 19 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 19 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 22 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 22 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 22 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 31 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 31 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 31 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 36 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 36 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 36 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 42 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 42 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 42 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 48 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 48 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 48 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 50 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 50 | 0.42 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 50 | 0.42 |
| (1,827) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:30:LEU:H | 37 | 0.42 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.42 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.42 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.42 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.42 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.42 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 43 | 0.42 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 43 | 0.42 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 43 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.42 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.42 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.42 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 6 | 0.42 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 17 | 0.42 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 23 | 0.42 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 31 | 0.42 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 32 | 0.42 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 42 | 0.42 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 50 | 0.42 |
| (1,709) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 39 | 0.42 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 23 | 0.42 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 23 | 0.42 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 26 | 0.42 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 26 | 0.42 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 37 | 0.42 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 37 | 0.42 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 16 | 0.42 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 26 | 0.42 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 35 | 0.42 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 37 | 0.42 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 41 | 0.42 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 42 | 0.42 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 48 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 2 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 2 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 2 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 3 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 3 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 3 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 8 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 8 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 8 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 13 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 13 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 13 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 16 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 16 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 16 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 22 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 22 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 22 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 31 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 31 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 31 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 35 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 35 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 35 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 36 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 36 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 36 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 38 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 38 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 38 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 44 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 44 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 44 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 50 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 50 | 0.42 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 50 | 0.42 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 5 | 0.42 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 9 | 0.42 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 14 | 0.42 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 17 | 0.42 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 18 | 0.42 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 20 | 0.42 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 22 | 0.42 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 28 | 0.42 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 29 | 0.42 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 37 | 0.42 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 42 | 0.42 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 47 | 0.42 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 1 | 0.42 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 5 | 0.42 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 8 | 0.42 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 17 | 0.42 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 29 | 0.42 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 37 | 0.42 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 44 | 0.42 |
| (1,573) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 46 | 0.42 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 38 | 0.42 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 38 | 0.42 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 38 | 0.42 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 22 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 22 | 0.42 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 10 | 0.42 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 5 | 0.42 |
| (1,512) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 49 | 0.42 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 2 | 0.42 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 3 | 0.42 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 5 | 0.42 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 14 | 0.42 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 18 | 0.42 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 21 | 0.42 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 24 | 0.42 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 32 | 0.42 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 34 | 0.42 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 46 | 0.42 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 47 | 0.42 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 1 | 0.42 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 27 | 0.42 |
| (1,291) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:13:CYS:HB3 | 24 | 0.42 |
| (1,291) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:13:CYS:HB3 | 28 | 0.42 |
| (1,251) | 1:A:33:SER:H | 1:A:32:ARG:HA | 46 | 0.42 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 7 | 0.42 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 9 | 0.42 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 18 | 0.42 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 28 | 0.42 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 9 | 0.42 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 9 | 0.42 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 9 | 0.42 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 16 | 0.42 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 16 | 0.42 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 16 | 0.42 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 49 | 0.42 |
| (1,151) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB3 | 15 | 0.42 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 40 | 0.42 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 40 | 0.42 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 40 | 0.42 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 2 | 0.42 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 31 | 0.42 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 31 | 0.42 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 31 | 0.42 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 31 | 0.42 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 31 | 0.42 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 31 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 32 | 0.42 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 32 | 0.42 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 32 | 0.42 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 32 | 0.42 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 32 | 0.42 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 32 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 3 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 3 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 3 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 3 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 3 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 3 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 3 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 3 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 3 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 13 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 13 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 13 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 13 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 13 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 13 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 13 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 13 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 13 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 15 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 15 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 15 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 15 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 15 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 15 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 15 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 15 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 15 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 22 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 22 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 22 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 22 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 22 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 22 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 22 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 22 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 22 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 23 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 23 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 23 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 23 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 23 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 23 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 23 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 23 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 23 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 26 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 26 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 26 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 26 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 26 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 26 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 26 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 26 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 26 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 33 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 33 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 33 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 33 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 33 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 33 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 33 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 33 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 33 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 36 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 36 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 36 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 36 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 36 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 36 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 36 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 36 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 36 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 40 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 40 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 40 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 40 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 40 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 40 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 40 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 40 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 40 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 45 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 45 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 45 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 45 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 45 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 45 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 45 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 45 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 45 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 47 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 47 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 47 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 47 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 47 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 47 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 47 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 47 | 0.42 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 47 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 8 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 8 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 8 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 8 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 8 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 8 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 12 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 12 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 12 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 12 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 12 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 12 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 13 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 13 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 13 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 13 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 13 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 13 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 21 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 21 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 21 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 21 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 21 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 21 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 32 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 32 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 32 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 32 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 32 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 32 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 36 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 36 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 36 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 36 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 36 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 36 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 40 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 40 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 40 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 40 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 40 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 40 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 43 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 43 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 43 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 43 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 43 | 0.42 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 43 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 2 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 2 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 2 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 2 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 4 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 4 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 4 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 4 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 13 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 13 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 13 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 13 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 15 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 15 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 15 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 15 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 19 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 19 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 19 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 19 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 43 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 43 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 43 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 43 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 45 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 45 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 45 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 45 | 0.42 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 7 | 0.41 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 17 | 0.41 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 40 | 0.41 |
| (2,927) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 31 | 0.41 |
| (2,926) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 2 | 0.41 |
| (2,926) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 26 | 0.41 |
| (2,926) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 34 | 0.41 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 23 | 0.41 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 1 | 0.41 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 15 | 0.41 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 46 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 3 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 3 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 3 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 5 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 5 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 5 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 6 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 6 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 6 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 9 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 9 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 9 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 15 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 15 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 15 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 17 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 17 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 17 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 37 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 37 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 37 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 46 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 46 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 46 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 49 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 49 | 0.41 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 49 | 0.41 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 13 | 0.41 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 13 | 0.41 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 30 | 0.41 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 6 | 0.41 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 1 | 0.41 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 10 | 0.41 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 11 | 0.41 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 13 | 0.41 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 15 | 0.41 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 29 | 0.41 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 45 | 0.41 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 48 | 0.41 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 50 | 0.41 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 4 | 0.41 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 14 | 0.41 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 19 | 0.41 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 25 | 0.41 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 26 | 0.41 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 41 | 0.41 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 48 | 0.41 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 15 | 0.41 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 15 | 0.41 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 36 | 0.41 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 36 | 0.41 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 6 | 0.41 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 45 | 0.41 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 45 | 0.41 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.41 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 40 | 0.41 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 37 | 0.41 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 26 | 0.41 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 26 | 0.41 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 26 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 27 | 0.41 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 27 | 0.41 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 27 | 0.41 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 40 | 0.41 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 40 | 0.41 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 40 | 0.41 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 49 | 0.41 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 24 | 0.41 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 24 | 0.41 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 24 | 0.41 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 45 | 0.41 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 45 | 0.41 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 45 | 0.41 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 6 | 0.41 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 38 | 0.41 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 42 | 0.41 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 12 | 0.41 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 24 | 0.41 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 37 | 0.41 |
| (2,522) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 5 | 0.41 |
| (2,522) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 39 | 0.41 |
| (2,507) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 21 | 0.41 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 1 | 0.41 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 10 | 0.41 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 11 | 0.41 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 13 | 0.41 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 15 | 0.41 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 29 | 0.41 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 45 | 0.41 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 48 | 0.41 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 15 | 0.41 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 15 | 0.41 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 36 | 0.41 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 36 | 0.41 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 38 | 0.41 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 42 | 0.41 |
| (2,452) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 31 | 0.41 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 50 | 0.41 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 12 | 0.41 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 24 | 0.41 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 37 | 0.41 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 26 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 26 | 0.41 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 26 | 0.41 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 27 | 0.41 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 27 | 0.41 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 27 | 0.41 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 40 | 0.41 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 40 | 0.41 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 40 | 0.41 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 49 | 0.41 |
| (2,420) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 5 | 0.41 |
| (2,420) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 39 | 0.41 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 6 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 3 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 3 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 3 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 5 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 5 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 5 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 6 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 6 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 6 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 9 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 9 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 9 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 15 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 15 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 15 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 17 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 17 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 17 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 37 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 37 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 37 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 46 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 46 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 46 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 49 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 49 | 0.41 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 49 | 0.41 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 4 | 0.41 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 14 | 0.41 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 19 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 25 | 0.41 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 26 | 0.41 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 41 | 0.41 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 48 | 0.41 |
| (2,354) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 21 | 0.41 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 23 | 0.41 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 45 | 0.41 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 45 | 0.41 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 13 | 0.41 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 13 | 0.41 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 1 | 0.41 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 15 | 0.41 |
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 46 | 0.41 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 30 | 0.41 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 40 | 0.41 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 37 | 0.41 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 7 | 0.41 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 17 | 0.41 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 40 | 0.41 |
| (2,156) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 2 | 0.41 |
| (2,156) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 26 | 0.41 |
| (2,156) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 34 | 0.41 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:H | 27 | 0.41 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:H | 27 | 0.41 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 25 | 0.41 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 25 | 0.41 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 38 | 0.41 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 38 | 0.41 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 38 | 0.41 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 38 | 0.41 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 38 | 0.41 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 38 | 0.41 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 38 | 0.41 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 38 | 0.41 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 38 | 0.41 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 5 | 0.41 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 24 | 0.41 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 16 | 0.41 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 16 | 0.41 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 7 | 0.41 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 17 | 0.41 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 40 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,901) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:H | 31 | 0.41 |
| (1,900) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 2 | 0.41 |
| (1,900) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 26 | 0.41 |
| (1,900) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 34 | 0.41 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 23 | 0.41 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 1 | 0.41 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 15 | 0.41 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 46 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 3 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 3 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 3 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 5 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 5 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 5 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 6 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 6 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 6 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 9 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 9 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 9 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 15 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 15 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 15 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 17 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 17 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 17 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 37 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 37 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 37 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 46 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 46 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 46 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 49 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 49 | 0.41 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 49 | 0.41 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 13 | 0.41 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 13 | 0.41 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 30 | 0.41 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 50 | 0.41 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 4 | 0.41 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 14 | 0.41 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 19 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 25 | 0.41 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 26 | 0.41 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 41 | 0.41 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 48 | 0.41 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 15 | 0.41 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 15 | 0.41 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 36 | 0.41 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 36 | 0.41 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 6 | 0.41 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 45 | 0.41 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 45 | 0.41 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 24 | 0.41 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 33 | 0.41 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 40 | 0.41 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 37 | 0.41 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 26 | 0.41 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 26 | 0.41 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 26 | 0.41 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 27 | 0.41 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 27 | 0.41 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 27 | 0.41 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 40 | 0.41 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 40 | 0.41 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 40 | 0.41 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 49 | 0.41 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 6 | 0.41 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 38 | 0.41 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 42 | 0.41 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 12 | 0.41 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 24 | 0.41 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 37 | 0.41 |
| (1,512) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 5 | 0.41 |
| (1,512) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 39 | 0.41 |
| (1,497) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 21 | 0.41 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 1 | 0.41 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 10 | 0.41 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 11 | 0.41 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 13 | 0.41 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 15 | 0.41 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 29 | 0.41 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 45 | 0.41 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 48 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 22 | 0.41 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 22 | 0.41 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 31 | 0.41 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 38 | 0.41 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 15 | 0.41 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 35 | 0.41 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 2 | 0.41 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 26 | 0.41 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 29 | 0.41 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 33 | 0.41 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 39 | 0.41 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 48 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 4 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 4 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 4 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 32 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 32 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 32 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 32 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 32 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 32 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 36 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 36 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 36 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 36 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 36 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 36 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 40 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 40 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 40 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 40 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 40 | 0.41 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 40 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 1 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 1 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 1 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 1 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 1 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 1 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 1 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 1 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 1 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 8 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 8 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 8 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 8 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 8 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 8 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 8 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 8 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 8 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 14 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 14 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 14 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 14 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 14 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 14 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 14 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 14 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 14 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 24 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 24 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 24 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 24 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 24 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 24 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 24 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 24 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 24 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 29 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 29 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 29 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 29 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 29 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 29 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 29 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 29 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 29 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 32 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 32 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 32 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 32 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 32 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 32 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 32 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 32 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 32 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 34 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 34 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 34 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 34 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 34 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 34 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 34 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 34 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 34 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 46 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 46 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 46 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 46 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 46 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 46 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 46 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 46 | 0.41 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 46 | 0.41 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 43 | 0.41 |
| (1,1023) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:7:LYS:HD2 | 43 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 3 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 3 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 3 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 3 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 3 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 3 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 6 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 6 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 6 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 6 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 6 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 6 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 11 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 11 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 11 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 11 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 11 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 11 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 18 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 18 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 18 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 18 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 18 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 18 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 29 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 29 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 29 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 29 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 29 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 29 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 31 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 31 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 31 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 31 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 31 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 31 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 33 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 33 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 33 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 33 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 33 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 33 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 49 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 49 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 49 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 49 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 49 | 0.41 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 49 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 1 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 1 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 1 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 1 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 2 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 2 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 2 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 2 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 3 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 3 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 3 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 3 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 4 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 4 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 4 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 4 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 5 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 5 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 5 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 5 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 6 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 6 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 6 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 6 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 8 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 8 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 8 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 8 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 9 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 9 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 9 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 9 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 10 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 10 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 10 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 10 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 11 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 11 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 11 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 11 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 12 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 12 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 12 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 12 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 13 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 13 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 13 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 13 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 14 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 14 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 14 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 14 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 15 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 15 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 15 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 15 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 17 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 17 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 17 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 17 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 18 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 18 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 18 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 18 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 19 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 19 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 19 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 19 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 20 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 20 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 20 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 20 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 21 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 21 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 21 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 21 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 22 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 22 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 22 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 22 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 23 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 23 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 23 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 23 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 24 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 24 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 24 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 24 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 25 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 25 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 25 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 25 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 26 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 26 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 26 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 26 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 27 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 27 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 27 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 27 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 28 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 28 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 28 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 28 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 29 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 29 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 29 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 29 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 30 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 30 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 30 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 30 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 31 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 31 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 31 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 31 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 32 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 32 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 32 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 32 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 33 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 33 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 33 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 33 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 34 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 34 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 34 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 34 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 35 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 35 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 35 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 35 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 36 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 36 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 36 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 36 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 37 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 37 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 37 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 37 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 38 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 38 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 38 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 38 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 39 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 39 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 39 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 39 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 41 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 41 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 41 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 41 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 42 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 42 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 42 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 42 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 44 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 44 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 44 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 44 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 45 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 45 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 45 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 45 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 46 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 46 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 46 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 46 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 47 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 47 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 47 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 47 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 48 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 48 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 48 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 48 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 50 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 50 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 50 | 0.41 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 50 | 0.41 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 16 | 0.4 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 26 | 0.4 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 33 | 0.4 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 34 | 0.4 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 35 | 0.4 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 38 | 0.4 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 39 | 0.4 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 40 | 0.4 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 43 | 0.4 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 48 | 0.4 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 24 | 0.4 |
| (2,926) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 39 | 0.4 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 39 | 0.4 |
| (2,894) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 3 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 2 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 2 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 2 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 7 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 7 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 7 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 10 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 10 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 10 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 16 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 16 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 16 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 21 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 21 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 21 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 26 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 26 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 26 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 30 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 30 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 30 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 33 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 33 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 33 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 34 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 34 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 34 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 39 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 39 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 39 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 45 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 45 | 0.4 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 45 | 0.4 |
| (2,855) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.4 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 28 | 0.4 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 28 | 0.4 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.4 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.4 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.4 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.4 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 9 | 0.4 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 25 | 0.4 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 27 | 0.4 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 33 | 0.4 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 41 | 0.4 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 5 | 0.4 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 16 | 0.4 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 22 | 0.4 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 27 | 0.4 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 33 | 0.4 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 38 | 0.4 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 45 | 0.4 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 46 | 0.4 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 5 | 0.4 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 36 | 0.4 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 36 | 0.4 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.4 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.4 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.4 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.4 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 26 | 0.4 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 26 | 0.4 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 26 | 0.4 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 9 | 0.4 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 9 | 0.4 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 9 | 0.4 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 10 | 0.4 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 10 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 10 | 0.4 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 23 | 0.4 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 23 | 0.4 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 23 | 0.4 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 16 | 0.4 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 26 | 0.4 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 33 | 0.4 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 34 | 0.4 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 35 | 0.4 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 38 | 0.4 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 39 | 0.4 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 40 | 0.4 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 43 | 0.4 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 48 | 0.4 |
| (2,631) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 4 | 0.4 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 4 | 0.4 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 4 | 0.4 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 4 | 0.4 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 15 | 0.4 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 15 | 0.4 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 15 | 0.4 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 19 | 0.4 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 19 | 0.4 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 19 | 0.4 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 27 | 0.4 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 27 | 0.4 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 27 | 0.4 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 45 | 0.4 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 45 | 0.4 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 45 | 0.4 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 46 | 0.4 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 46 | 0.4 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 46 | 0.4 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 14 | 0.4 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 14 | 0.4 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 14 | 0.4 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 20 | 0.4 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 20 | 0.4 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 20 | 0.4 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 35 | 0.4 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 35 | 0.4 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 35 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 26 | 0.4 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 26 | 0.4 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 26 | 0.4 |
| (2,507) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 6 | 0.4 |
| (2,507) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 12 | 0.4 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 7 | 0.4 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 7 | 0.4 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 12 | 0.4 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 12 | 0.4 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 37 | 0.4 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 37 | 0.4 |
| (2,492) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 10 | 0.4 |
| (2,492) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 10 | 0.4 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 9 | 0.4 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 25 | 0.4 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 27 | 0.4 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 33 | 0.4 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 41 | 0.4 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.4 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.4 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.4 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 9 | 0.4 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 9 | 0.4 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 9 | 0.4 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 10 | 0.4 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 10 | 0.4 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 10 | 0.4 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 23 | 0.4 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 23 | 0.4 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 23 | 0.4 |
| (2,428) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 4 | 0.4 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 5 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 2 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 2 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 2 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 7 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 7 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 7 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 10 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 10 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 10 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 16 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 16 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 16 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 21 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 21 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 21 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 26 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 26 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 26 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 30 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 30 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 30 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 33 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 33 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 33 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 34 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 34 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 34 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 39 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 39 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 39 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 45 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 45 | 0.4 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 45 | 0.4 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 5 | 0.4 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 16 | 0.4 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 22 | 0.4 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 27 | 0.4 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 33 | 0.4 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 38 | 0.4 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 45 | 0.4 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 46 | 0.4 |
| (2,354) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 6 | 0.4 |
| (2,354) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 12 | 0.4 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 39 | 0.4 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 36 | 0.4 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 36 | 0.4 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 28 | 0.4 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 28 | 0.4 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.4 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.4 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.4 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,245) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 3 | 0.4 |
| (2,244) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.4 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 24 | 0.4 |
| (2,156) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 39 | 0.4 |
| (2,147) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 10 | 0.4 |
| (2,147) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 10 | 0.4 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 7 | 0.4 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 7 | 0.4 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 12 | 0.4 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 12 | 0.4 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 37 | 0.4 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 37 | 0.4 |
| (1,96) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB2 | 20 | 0.4 |
| (1,96) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB2 | 21 | 0.4 |
| (1,96) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB2 | 33 | 0.4 |
| (1,96) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB2 | 45 | 0.4 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 23 | 0.4 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 23 | 0.4 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 9 | 0.4 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 9 | 0.4 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 13 | 0.4 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 13 | 0.4 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 23 | 0.4 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 23 | 0.4 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 41 | 0.4 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 41 | 0.4 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 24 | 0.4 |
| (1,900) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 39 | 0.4 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 39 | 0.4 |
| (1,868) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:H | 3 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 2 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 2 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 2 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 7 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 7 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 7 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 10 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 10 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 10 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 16 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 16 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 16 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 21 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 21 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 21 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 26 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 26 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 26 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 30 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 30 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 30 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 33 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 33 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 33 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 34 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 34 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 34 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 39 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 39 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 39 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 45 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 45 | 0.4 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 45 | 0.4 |
| (1,829) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.4 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 28 | 0.4 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 28 | 0.4 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.4 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.4 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.4 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.4 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 5 | 0.4 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 16 | 0.4 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 22 | 0.4 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 27 | 0.4 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 33 | 0.4 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 38 | 0.4 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 45 | 0.4 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 46 | 0.4 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 5 | 0.4 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 36 | 0.4 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 36 | 0.4 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.4 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.4 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 9 | 0.4 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 9 | 0.4 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 9 | 0.4 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 10 | 0.4 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 10 | 0.4 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 10 | 0.4 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 23 | 0.4 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 23 | 0.4 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 23 | 0.4 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 16 | 0.4 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 26 | 0.4 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 33 | 0.4 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 34 | 0.4 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 35 | 0.4 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 38 | 0.4 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 39 | 0.4 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 40 | 0.4 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 43 | 0.4 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 48 | 0.4 |
| (1,612) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 4 | 0.4 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 26 | 0.4 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 26 | 0.4 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 26 | 0.4 |
| (1,497) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 6 | 0.4 |
| (1,497) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 12 | 0.4 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 7 | 0.4 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 7 | 0.4 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 12 | 0.4 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 12 | 0.4 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 37 | 0.4 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 37 | 0.4 |
| (1,482) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 10 | 0.4 |
| (1,482) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 10 | 0.4 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 9 | 0.4 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 25 | 0.4 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 27 | 0.4 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 33 | 0.4 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 41 | 0.4 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 8 | 0.4 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 8 | 0.4 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 22 | 0.4 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 4 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 16 | 0.4 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 17 | 0.4 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 22 | 0.4 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 41 | 0.4 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 46 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 1 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 1 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 1 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 1 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 1 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 1 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 2 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 2 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 2 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 2 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 2 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 2 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 12 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 12 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 12 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 12 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 12 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 12 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 13 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 13 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 13 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 13 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 13 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 13 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 17 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 17 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 17 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 17 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 17 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 17 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 20 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 20 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 20 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 20 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 20 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 20 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 26 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 26 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 26 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 26 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 26 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 26 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 33 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 33 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 33 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 33 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 33 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 33 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 39 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 39 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 39 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 39 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 39 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 39 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 43 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 43 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 43 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 43 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 43 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 43 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 45 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 45 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 45 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 45 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 45 | 0.4 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 45 | 0.4 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 1 | 0.4 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 1 | 0.4 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 1 | 0.4 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 1 | 0.4 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 1 | 0.4 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 1 | 0.4 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 7 | 0.4 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 7 | 0.4 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 7 | 0.4 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 7 | 0.4 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 7 | 0.4 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 7 | 0.4 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 23 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 23 | 0.4 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 23 | 0.4 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 23 | 0.4 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 23 | 0.4 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 23 | 0.4 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:HA | 30 | 0.4 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:HA | 30 | 0.4 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 23 | 0.4 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 23 | 0.4 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 23 | 0.4 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 23 | 0.4 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 32 | 0.4 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 32 | 0.4 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 32 | 0.4 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 32 | 0.4 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG2 | 42 | 0.4 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 42 | 0.4 |
| (1,1015) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 42 | 0.4 |
| (1,1015) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HG3 | 42 | 0.4 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 7 | 0.4 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 7 | 0.4 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 7 | 0.4 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 7 | 0.4 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 40 | 0.4 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 40 | 0.4 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 40 | 0.4 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 40 | 0.4 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 43 | 0.4 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 43 | 0.4 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 43 | 0.4 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 43 | 0.4 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 49 | 0.4 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 49 | 0.4 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 49 | 0.4 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 49 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 11 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 11 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 11 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 11 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 11 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 11 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 11 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 11 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 11 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 23 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 23 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 23 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 23 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 23 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 23 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 23 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 23 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 23 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 34 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 34 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 34 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 34 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 34 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 34 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 34 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 34 | 0.4 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 34 | 0.4 |
| (2,926) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 8 | 0.39 |
| (2,926) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 18 | 0.39 |
| (2,926) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 37 | 0.39 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.39 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 8 | 0.39 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 8 | 0.39 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 8 | 0.39 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 29 | 0.39 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 29 | 0.39 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 29 | 0.39 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 43 | 0.39 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 43 | 0.39 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 43 | 0.39 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 44 | 0.39 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 44 | 0.39 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 44 | 0.39 |
| (2,850) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 20 | 0.39 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.39 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.39 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.39 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.39 |
| (2,814) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 35 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 6 | 0.39 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 17 | 0.39 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 19 | 0.39 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 43 | 0.39 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 7 | 0.39 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 29 | 0.39 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 37 | 0.39 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 47 | 0.39 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 50 | 0.39 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 50 | 0.39 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 9 | 0.39 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 13 | 0.39 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 34 | 0.39 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 17 | 0.39 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 17 | 0.39 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 39 | 0.39 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 39 | 0.39 |
| (2,702) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 26 | 0.39 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 13 | 0.39 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.39 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.39 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.39 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 3 | 0.39 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 3 | 0.39 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 3 | 0.39 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 27 | 0.39 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 27 | 0.39 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 27 | 0.39 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.39 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.39 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.39 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 36 | 0.39 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 36 | 0.39 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 36 | 0.39 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 42 | 0.39 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 42 | 0.39 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 42 | 0.39 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.39 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.39 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.39 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 9 | 0.39 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 9 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 9 | 0.39 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 43 | 0.39 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 43 | 0.39 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 43 | 0.39 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 7 | 0.39 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG21 | 1:A:12:GLN:HE22 | 18 | 0.39 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG22 | 1:A:12:GLN:HE22 | 18 | 0.39 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG23 | 1:A:12:GLN:HE22 | 18 | 0.39 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 38 | 0.39 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 48 | 0.39 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 20 | 0.39 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 20 | 0.39 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 20 | 0.39 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 33 | 0.39 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 33 | 0.39 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 33 | 0.39 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 43 | 0.39 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 43 | 0.39 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 43 | 0.39 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 45 | 0.39 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 45 | 0.39 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 45 | 0.39 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 8 | 0.39 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 8 | 0.39 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 8 | 0.39 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 35 | 0.39 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 35 | 0.39 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 35 | 0.39 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 37 | 0.39 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 37 | 0.39 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 37 | 0.39 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 49 | 0.39 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 49 | 0.39 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 49 | 0.39 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 5 | 0.39 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 5 | 0.39 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 5 | 0.39 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.39 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.39 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.39 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 9 | 0.39 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 9 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 9 | 0.39 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 43 | 0.39 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 43 | 0.39 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 43 | 0.39 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 19 | 0.39 |
| (2,507) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 32 | 0.39 |
| (2,5) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 20 | 0.39 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 6 | 0.39 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 17 | 0.39 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 19 | 0.39 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 43 | 0.39 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 50 | 0.39 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 50 | 0.39 |
| (2,462) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 35 | 0.39 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 19 | 0.39 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.39 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.39 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.39 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.39 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 20 | 0.39 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 20 | 0.39 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 20 | 0.39 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 33 | 0.39 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 33 | 0.39 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 33 | 0.39 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 43 | 0.39 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 43 | 0.39 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 43 | 0.39 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 45 | 0.39 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 45 | 0.39 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 45 | 0.39 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 9 | 0.39 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 13 | 0.39 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 34 | 0.39 |
| (2,390) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 26 | 0.39 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 8 | 0.39 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 8 | 0.39 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 8 | 0.39 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 29 | 0.39 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 29 | 0.39 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 29 | 0.39 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 43 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 43 | 0.39 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 43 | 0.39 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 44 | 0.39 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 44 | 0.39 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 44 | 0.39 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 7 | 0.39 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 29 | 0.39 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 37 | 0.39 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 47 | 0.39 |
| (2,354) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 32 | 0.39 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 3 | 0.39 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 3 | 0.39 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 3 | 0.39 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 27 | 0.39 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 27 | 0.39 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 27 | 0.39 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 17 | 0.39 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 17 | 0.39 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 39 | 0.39 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 39 | 0.39 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.39 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.39 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.39 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.39 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 7 | 0.39 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 38 | 0.39 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 48 | 0.39 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 13 | 0.39 |
| (2,156) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 8 | 0.39 |
| (2,156) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 18 | 0.39 |
| (2,156) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 37 | 0.39 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 9 | 0.39 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 9 | 0.39 |
| (1,97) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG2 | 37 | 0.39 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 5 | 0.39 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 5 | 0.39 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 14 | 0.39 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 14 | 0.39 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 33 | 0.39 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 33 | 0.39 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 35 | 0.39 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 35 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 46 | 0.39 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 46 | 0.39 |
| (1,900) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 8 | 0.39 |
| (1,900) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 18 | 0.39 |
| (1,900) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:11:GLU:HG3 | 37 | 0.39 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.39 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 8 | 0.39 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 8 | 0.39 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 8 | 0.39 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 29 | 0.39 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 29 | 0.39 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 29 | 0.39 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 43 | 0.39 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 43 | 0.39 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 43 | 0.39 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 44 | 0.39 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 44 | 0.39 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 44 | 0.39 |
| (1,824) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 20 | 0.39 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.39 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.39 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.39 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.39 |
| (1,789) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 35 | 0.39 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 7 | 0.39 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 29 | 0.39 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 37 | 0.39 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 47 | 0.39 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 50 | 0.39 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 50 | 0.39 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 9 | 0.39 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 13 | 0.39 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 34 | 0.39 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 17 | 0.39 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 17 | 0.39 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 39 | 0.39 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 39 | 0.39 |
| (1,678) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 26 | 0.39 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 13 | 0.39 |
| (1,67) | 1:A:22:GLN:HG2 | 1:A:22:GLN:HA | 19 | 0.39 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.39 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.39 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 3 | 0.39 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 3 | 0.39 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 3 | 0.39 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 27 | 0.39 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 27 | 0.39 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 27 | 0.39 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 7 | 0.39 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 38 | 0.39 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 48 | 0.39 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 20 | 0.39 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 20 | 0.39 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 20 | 0.39 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 33 | 0.39 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 33 | 0.39 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 33 | 0.39 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 43 | 0.39 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 43 | 0.39 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 43 | 0.39 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 45 | 0.39 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 45 | 0.39 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 45 | 0.39 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.39 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.39 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.39 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 9 | 0.39 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 9 | 0.39 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 9 | 0.39 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 43 | 0.39 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 43 | 0.39 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 43 | 0.39 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 19 | 0.39 |
| (1,497) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 32 | 0.39 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 6 | 0.39 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 17 | 0.39 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 19 | 0.39 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 43 | 0.39 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 4 | 0.39 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 4 | 0.39 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 25 | 0.39 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 9 | 0.39 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 49 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 3 | 0.39 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 8 | 0.39 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 17 | 0.39 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 25 | 0.39 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 27 | 0.39 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 47 | 0.39 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 20 | 0.39 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 20 | 0.39 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 20 | 0.39 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 21 | 0.39 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 21 | 0.39 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 21 | 0.39 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 36 | 0.39 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 36 | 0.39 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 36 | 0.39 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 47 | 0.39 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 47 | 0.39 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 47 | 0.39 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 43 | 0.39 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 43 | 0.39 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 43 | 0.39 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 24 | 0.39 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 24 | 0.39 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 24 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 11 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 11 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 11 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 11 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 11 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 11 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 16 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 16 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 16 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 16 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 16 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 16 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 27 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 27 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 27 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 35 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 35 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 35 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 35 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 35 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 35 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 37 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 37 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 37 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 37 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 37 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 37 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 41 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 41 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 41 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 41 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 41 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 41 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 42 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 42 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 42 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 42 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 42 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 42 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 47 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 47 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 47 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 47 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 47 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 47 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 48 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 48 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 48 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 48 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 48 | 0.39 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 48 | 0.39 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 37 | 0.39 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 37 | 0.39 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 42 | 0.39 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 42 | 0.39 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 45 | 0.39 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 45 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 20 | 0.39 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 20 | 0.39 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 20 | 0.39 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 20 | 0.39 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 20 | 0.39 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 20 | 0.39 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 37 | 0.39 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 37 | 0.39 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:HA | 8 | 0.39 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:HA | 8 | 0.39 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:HA | 17 | 0.39 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:HA | 17 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 7 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 7 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 7 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 7 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 7 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 7 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 7 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 7 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 7 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 31 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 31 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 31 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 31 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 31 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 31 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 31 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 31 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 31 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 37 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 37 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 37 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 37 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 37 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 37 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 37 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 37 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 37 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 47 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 47 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 47 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 47 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 47 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 47 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 47 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 47 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 47 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 48 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 48 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 48 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 48 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 48 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 48 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 48 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 48 | 0.39 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 48 | 0.39 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 2 | 0.38 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 4 | 0.38 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 19 | 0.38 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 36 | 0.38 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 41 | 0.38 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 44 | 0.38 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 45 | 0.38 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 19 | 0.38 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 42 | 0.38 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 48 | 0.38 |
| (2,925) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 28 | 0.38 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 40 | 0.38 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 12 | 0.38 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 12 | 0.38 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 12 | 0.38 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 27 | 0.38 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 27 | 0.38 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 27 | 0.38 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.38 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.38 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 28 | 0.38 |
| (2,814) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 7 | 0.38 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 12 | 0.38 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 23 | 0.38 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 40 | 0.38 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 40 | 0.38 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 9 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 21 | 0.38 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.38 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 1 | 0.38 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 9 | 0.38 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 39 | 0.38 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 11 | 0.38 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 11 | 0.38 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 13 | 0.38 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 13 | 0.38 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 19 | 0.38 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 19 | 0.38 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 42 | 0.38 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 42 | 0.38 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 47 | 0.38 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 47 | 0.38 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 22 | 0.38 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 33 | 0.38 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 29 | 0.38 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 29 | 0.38 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 29 | 0.38 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.38 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 9 | 0.38 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 9 | 0.38 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 9 | 0.38 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 22 | 0.38 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 22 | 0.38 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 22 | 0.38 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 35 | 0.38 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 35 | 0.38 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 35 | 0.38 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 48 | 0.38 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 48 | 0.38 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 48 | 0.38 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 49 | 0.38 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 49 | 0.38 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 49 | 0.38 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 13 | 0.38 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 13 | 0.38 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 13 | 0.38 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 21 | 0.38 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 21 | 0.38 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 21 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 44 | 0.38 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 44 | 0.38 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 44 | 0.38 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 18 | 0.38 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 24 | 0.38 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 37 | 0.38 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 9 | 0.38 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 2 | 0.38 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 4 | 0.38 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 19 | 0.38 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 36 | 0.38 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 41 | 0.38 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 44 | 0.38 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 45 | 0.38 |
| (2,631) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 42 | 0.38 |
| (2,631) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 49 | 0.38 |
| (2,582) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 39 | 0.38 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.38 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.38 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.38 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 33 | 0.38 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 33 | 0.38 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 33 | 0.38 |
| (2,570) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 37 | 0.38 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 13 | 0.38 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 13 | 0.38 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 13 | 0.38 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 21 | 0.38 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 21 | 0.38 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 21 | 0.38 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 44 | 0.38 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 44 | 0.38 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 44 | 0.38 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 40 | 0.38 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 40 | 0.38 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 29 | 0.38 |
| (2,510) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HA | 31 | 0.38 |
| (2,507) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 7 | 0.38 |
| (2,507) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 25 | 0.38 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 47 | 0.38 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 47 | 0.38 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 12 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 23 | 0.38 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 40 | 0.38 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 11 | 0.38 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 11 | 0.38 |
| (2,462) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 7 | 0.38 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 40 | 0.38 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 40 | 0.38 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 9 | 0.38 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 21 | 0.38 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.38 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 29 | 0.38 |
| (2,428) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 42 | 0.38 |
| (2,428) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 49 | 0.38 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 28 | 0.38 |
| (2,379) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HA | 31 | 0.38 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 12 | 0.38 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 12 | 0.38 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 12 | 0.38 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 27 | 0.38 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 27 | 0.38 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 27 | 0.38 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 1 | 0.38 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 9 | 0.38 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 39 | 0.38 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 40 | 0.38 |
| (2,354) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 7 | 0.38 |
| (2,354) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 25 | 0.38 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 29 | 0.38 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 29 | 0.38 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 29 | 0.38 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 40 | 0.38 |
| (2,315) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 39 | 0.38 |
| (2,285) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 28 | 0.38 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 13 | 0.38 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 13 | 0.38 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 19 | 0.38 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 19 | 0.38 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 42 | 0.38 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 42 | 0.38 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 47 | 0.38 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 47 | 0.38 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.38 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 18 | 0.38 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 24 | 0.38 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 37 | 0.38 |
| (2,181) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 37 | 0.38 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 9 | 0.38 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 22 | 0.38 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 33 | 0.38 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 19 | 0.38 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 42 | 0.38 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 48 | 0.38 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 47 | 0.38 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 47 | 0.38 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:H | 49 | 0.38 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:H | 49 | 0.38 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 20 | 0.38 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 20 | 0.38 |
| (1,96) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB2 | 5 | 0.38 |
| (1,96) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB2 | 19 | 0.38 |
| (1,96) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB2 | 26 | 0.38 |
| (1,96) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB2 | 39 | 0.38 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 31 | 0.38 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 31 | 0.38 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 8 | 0.38 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 8 | 0.38 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 11 | 0.38 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 11 | 0.38 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 28 | 0.38 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 28 | 0.38 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 40 | 0.38 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 40 | 0.38 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 45 | 0.38 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 45 | 0.38 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 49 | 0.38 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 49 | 0.38 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 19 | 0.38 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 42 | 0.38 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 48 | 0.38 |
| (1,899) | 1:A:20:PHE:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 28 | 0.38 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 40 | 0.38 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 12 | 0.38 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 12 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 12 | 0.38 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 27 | 0.38 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 27 | 0.38 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 27 | 0.38 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.38 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.38 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 28 | 0.38 |
| (1,789) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 7 | 0.38 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 40 | 0.38 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 9 | 0.38 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 21 | 0.38 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.38 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 1 | 0.38 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 9 | 0.38 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 39 | 0.38 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 11 | 0.38 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 11 | 0.38 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 13 | 0.38 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 13 | 0.38 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 19 | 0.38 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 19 | 0.38 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 42 | 0.38 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 42 | 0.38 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 47 | 0.38 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 47 | 0.38 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 22 | 0.38 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 33 | 0.38 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 29 | 0.38 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 29 | 0.38 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 29 | 0.38 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 18 | 0.38 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 24 | 0.38 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 37 | 0.38 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 9 | 0.38 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 2 | 0.38 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 4 | 0.38 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 19 | 0.38 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 36 | 0.38 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 41 | 0.38 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 44 | 0.38 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 45 | 0.38 |
| (1,612) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 42 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,612) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 49 | 0.38 |
| (1,566) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 39 | 0.38 |
| (1,559) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 37 | 0.38 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 13 | 0.38 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 13 | 0.38 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 13 | 0.38 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 21 | 0.38 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 21 | 0.38 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 21 | 0.38 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 44 | 0.38 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 44 | 0.38 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 44 | 0.38 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 40 | 0.38 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 40 | 0.38 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 29 | 0.38 |
| (1,500) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HA | 31 | 0.38 |
| (1,497) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 7 | 0.38 |
| (1,497) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 25 | 0.38 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 47 | 0.38 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 47 | 0.38 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 12 | 0.38 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 23 | 0.38 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 40 | 0.38 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 35 | 0.38 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 39 | 0.38 |
| (1,262) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 29 | 0.38 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 8 | 0.38 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 18 | 0.38 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 4 | 0.38 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 11 | 0.38 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 30 | 0.38 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 43 | 0.38 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 44 | 0.38 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 49 | 0.38 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:14:ASN:HB3 | 2 | 0.38 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:14:ASN:HB3 | 2 | 0.38 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:14:ASN:HB3 | 2 | 0.38 |
| (1,170) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 18 | 0.38 |
| (1,170) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 18 | 0.38 |
| (1,170) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 18 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 6 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 6 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 6 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 6 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 6 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 6 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 10 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 10 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 10 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 10 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 10 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 10 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 14 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 14 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 14 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 14 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 14 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 14 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 18 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 18 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 18 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 18 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 18 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 18 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 22 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 22 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 22 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 22 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 22 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 22 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 25 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 25 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 25 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 25 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 25 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 25 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 28 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 28 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 28 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 30 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 30 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 30 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 30 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 30 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 30 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 38 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 38 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 38 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 38 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 38 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 38 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 44 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 44 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 44 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 44 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 44 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 44 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 49 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 49 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 49 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 49 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 49 | 0.38 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 49 | 0.38 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 38 | 0.38 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 38 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 10 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 10 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 10 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 10 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 10 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 10 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 10 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 10 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 10 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 16 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 16 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 16 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 16 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 16 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 16 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 16 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 16 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 16 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 20 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 20 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 20 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 20 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 20 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 20 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 20 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 20 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 20 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 41 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 41 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 41 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 41 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 41 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 41 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 41 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 41 | 0.38 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 41 | 0.38 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HG2 | 49 | 0.38 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HG2 | 49 | 0.38 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HG2 | 49 | 0.38 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.38 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.38 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.38 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 15 | 0.38 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 15 | 0.38 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 6 | 0.38 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 6 | 0.38 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 25 | 0.38 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 25 | 0.38 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HG3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 16 | 0.38 |
| (1,1010) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 16 | 0.38 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HG3 | 16 | 0.38 |
| (1,1010) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:30:LEU:HB2 | 16 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 1 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 1 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 1 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 1 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 1 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 1 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 1 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 1 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 1 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 17 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 17 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 17 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 17 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 17 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 17 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 17 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 17 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 17 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 19 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 19 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 19 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 19 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 19 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 19 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 19 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 19 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 19 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 32 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 32 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 32 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 32 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 32 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 32 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 32 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 32 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 32 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 35 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 35 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 35 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 35 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 35 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 35 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 35 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 35 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 35 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 44 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 44 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 44 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 44 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 44 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 44 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 44 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 44 | 0.38 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 44 | 0.38 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 1 | 0.37 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 5 | 0.37 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 11 | 0.37 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 20 | 0.37 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 20 | 0.37 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 20 | 0.37 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 35 | 0.37 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 35 | 0.37 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 35 | 0.37 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 47 | 0.37 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 47 | 0.37 |
| (2,884) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 47 | 0.37 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 14 | 0.37 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 14 | 0.37 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 14 | 0.37 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 18 | 0.37 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.37 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.37 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.37 |
| (2,814) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 34 | 0.37 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 32 | 0.37 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 24 | 0.37 |
| (2,77) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 37 | 0.37 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 1 | 0.37 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 5 | 0.37 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 34 | 0.37 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 34 | 0.37 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 10 | 0.37 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 24 | 0.37 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 7 | 0.37 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 7 | 0.37 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 12 | 0.37 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 12 | 0.37 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 14 | 0.37 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 14 | 0.37 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 15 | 0.37 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 15 | 0.37 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 22 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 22 | 0.37 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 48 | 0.37 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 48 | 0.37 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 7 | 0.37 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 19 | 0.37 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.37 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.37 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.37 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.37 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.37 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.37 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 50 | 0.37 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 50 | 0.37 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 50 | 0.37 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.37 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 15 | 0.37 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 15 | 0.37 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 15 | 0.37 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 16 | 0.37 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 16 | 0.37 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 16 | 0.37 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 29 | 0.37 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 29 | 0.37 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 29 | 0.37 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 41 | 0.37 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 41 | 0.37 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 41 | 0.37 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 1 | 0.37 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 18 | 0.37 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 18 | 0.37 |
| (2,637) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 18 | 0.37 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 10 | 0.37 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 10 | 0.37 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 14 | 0.37 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 14 | 0.37 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 14 | 0.37 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 17 | 0.37 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 17 | 0.37 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 17 | 0.37 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 43 | 0.37 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 43 | 0.37 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 43 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 1 | 0.37 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 1 | 0.37 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 1 | 0.37 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 11 | 0.37 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 11 | 0.37 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 11 | 0.37 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 27 | 0.37 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 27 | 0.37 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 27 | 0.37 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 32 | 0.37 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 6 | 0.37 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 6 | 0.37 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 26 | 0.37 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 40 | 0.37 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 44 | 0.37 |
| (2,477) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 37 | 0.37 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 34 | 0.37 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 34 | 0.37 |
| (2,462) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 34 | 0.37 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 6 | 0.37 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 6 | 0.37 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 26 | 0.37 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 40 | 0.37 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 44 | 0.37 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 1 | 0.37 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.37 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.37 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.37 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 5 | 0.37 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 18 | 0.37 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 18 | 0.37 |
| (2,430) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 18 | 0.37 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 10 | 0.37 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 24 | 0.37 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 20 | 0.37 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 20 | 0.37 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 20 | 0.37 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 35 | 0.37 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 35 | 0.37 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 35 | 0.37 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 47 | 0.37 |
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 47 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,372) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 47 | 0.37 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 50 | 0.37 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 50 | 0.37 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 50 | 0.37 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 18 | 0.37 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 24 | 0.37 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 7 | 0.37 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 7 | 0.37 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 12 | 0.37 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 12 | 0.37 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 14 | 0.37 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 14 | 0.37 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 15 | 0.37 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 15 | 0.37 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 22 | 0.37 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 22 | 0.37 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 48 | 0.37 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 48 | 0.37 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 14 | 0.37 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 14 | 0.37 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 14 | 0.37 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 1 | 0.37 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 7 | 0.37 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 19 | 0.37 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 1 | 0.37 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 5 | 0.37 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 11 | 0.37 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 10 | 0.37 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 10 | 0.37 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:H | 36 | 0.37 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:H | 36 | 0.37 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 2 | 0.37 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 2 | 0.37 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 18 | 0.37 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 18 | 0.37 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 17 | 0.37 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 17 | 0.37 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 26 | 0.37 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 26 | 0.37 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 29 | 0.37 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 29 | 0.37 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 1 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 5 | 0.37 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 11 | 0.37 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 20 | 0.37 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 20 | 0.37 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 20 | 0.37 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 35 | 0.37 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 35 | 0.37 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 35 | 0.37 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 47 | 0.37 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 47 | 0.37 |
| (1,858) | 1:A:26:MET:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 47 | 0.37 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 14 | 0.37 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 14 | 0.37 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 14 | 0.37 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 18 | 0.37 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.37 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.37 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.37 |
| (1,789) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:H | 34 | 0.37 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 24 | 0.37 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 1 | 0.37 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 5 | 0.37 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 34 | 0.37 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 34 | 0.37 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 10 | 0.37 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 24 | 0.37 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 7 | 0.37 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 7 | 0.37 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 12 | 0.37 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 12 | 0.37 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 14 | 0.37 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 14 | 0.37 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 15 | 0.37 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 15 | 0.37 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 22 | 0.37 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 22 | 0.37 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 48 | 0.37 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 48 | 0.37 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 7 | 0.37 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 19 | 0.37 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.37 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.37 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 50 | 0.37 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 50 | 0.37 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 50 | 0.37 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 1 | 0.37 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD21 | 18 | 0.37 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD22 | 18 | 0.37 |
| (1,618) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD23 | 18 | 0.37 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 10 | 0.37 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 10 | 0.37 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 32 | 0.37 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 6 | 0.37 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 6 | 0.37 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 26 | 0.37 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 40 | 0.37 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 44 | 0.37 |
| (1,467) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD2 | 37 | 0.37 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 25 | 0.37 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 29 | 0.37 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 29 | 0.37 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 32 | 0.37 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 32 | 0.37 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 8 | 0.37 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 19 | 0.37 |
| (1,252) | 1:A:2:SER:H | 1:A:3:PRO:HG3 | 6 | 0.37 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 24 | 0.37 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 10 | 0.37 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 20 | 0.37 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 23 | 0.37 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 36 | 0.37 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 28 | 0.37 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 14 | 0.37 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 32 | 0.37 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 5 | 0.37 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 5 | 0.37 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 5 | 0.37 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 5 | 0.37 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 5 | 0.37 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 5 | 0.37 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 4 | 0.37 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 4 | 0.37 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 4 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 4 | 0.37 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 4 | 0.37 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 4 | 0.37 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 43 | 0.37 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 43 | 0.37 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 43 | 0.37 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 43 | 0.37 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 43 | 0.37 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 43 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 8 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 8 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 8 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 8 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 8 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 8 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 22 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 22 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 22 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 22 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 22 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 22 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 23 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 23 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 23 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 23 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 23 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 23 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 27 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 27 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 27 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 27 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 27 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 27 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 38 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 38 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 38 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 38 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 38 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 38 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 40 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 40 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 40 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 40 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 40 | 0.37 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 40 | 0.37 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 48 | 0.37 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 48 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 6 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 6 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 6 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 6 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 6 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 6 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 6 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 6 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 6 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 11 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 11 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 11 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 11 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 11 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 11 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 11 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 11 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 11 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 12 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 12 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 12 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 12 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 12 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 12 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 12 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 12 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 12 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 17 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 17 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 17 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 17 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 17 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 17 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 17 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 17 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 17 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 18 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 18 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 18 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 18 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 18 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 18 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 18 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 18 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 18 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 19 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 19 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 19 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 19 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 19 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 19 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 19 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 19 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 19 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 28 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 28 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 28 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 28 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 28 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 28 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 28 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 28 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 28 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 30 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 30 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 30 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 30 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 30 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 30 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 30 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 30 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 30 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 31 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 31 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 31 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 31 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 31 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 31 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 31 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 31 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 31 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 35 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 35 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 35 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 35 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 35 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 35 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 35 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 35 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 35 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 39 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 39 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 39 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 39 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 39 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 39 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 39 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 39 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 39 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 43 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 43 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 43 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 43 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 43 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 43 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 43 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 43 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 43 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 44 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 44 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 44 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 44 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 44 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 44 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 44 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 44 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 44 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 48 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 48 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 48 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 48 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 48 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 48 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 48 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 48 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 48 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 49 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 49 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 49 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 49 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 49 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 49 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 49 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 49 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 49 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 50 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 50 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 50 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 50 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 50 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 50 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 50 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 50 | 0.37 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 50 | 0.37 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HG2 | 21 | 0.37 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HG2 | 21 | 0.37 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HG2 | 21 | 0.37 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.37 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.37 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 1 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 1 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 3 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 3 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 5 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 5 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 8 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 8 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 14 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 14 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 22 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 22 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 27 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 27 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 29 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 29 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 31 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 31 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 46 | 0.37 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 46 | 0.37 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:HA | 36 | 0.37 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:HA | 36 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 2 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 2 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 2 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 2 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 2 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 2 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 2 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 2 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 2 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 6 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 6 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 6 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 6 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 6 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 6 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 6 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 6 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 6 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 8 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 8 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 8 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 8 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 8 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 8 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 8 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 8 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 8 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 9 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 9 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 9 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 9 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 9 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 9 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 9 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 9 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 9 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 10 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 10 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 10 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 10 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 10 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 10 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 10 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 10 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 10 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 12 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 12 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 12 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 12 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 12 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 12 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 12 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 12 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 12 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 21 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 21 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 21 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 21 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 21 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 21 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 21 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 21 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 21 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 30 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 30 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 30 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 30 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 30 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 30 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 30 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 30 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 30 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 36 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 36 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 36 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 36 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 36 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 36 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 36 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 36 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 36 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 39 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 39 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 39 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 39 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 39 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 39 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 39 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 39 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 39 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 41 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 41 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 41 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 41 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 41 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 41 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 41 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 41 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 41 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 43 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 43 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 43 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 43 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 43 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 43 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 43 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 43 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 43 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 45 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 45 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 45 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 45 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 45 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 45 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 45 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 45 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 45 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 49 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 49 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 49 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 49 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 49 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 49 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 49 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 49 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 49 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 50 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 50 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 50 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 50 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 50 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 50 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 50 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 50 | 0.37 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 50 | 0.37 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:H | 38 | 0.37 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 38 | 0.37 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 10 | 0.36 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 13 | 0.36 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 21 | 0.36 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 14 | 0.36 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 20 | 0.36 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 40 | 0.36 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 40 | 0.36 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 40 | 0.36 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 7 | 0.36 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 50 | 0.36 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 14 | 0.36 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 16 | 0.36 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.36 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 10 | 0.36 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 10 | 0.36 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 10 | 0.36 |
| (2,76) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 9 | 0.36 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 0.36 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 11 | 0.36 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 3 | 0.36 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 6 | 0.36 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 21 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 30 | 0.36 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 34 | 0.36 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 37 | 0.36 |
| (2,73) | 1:A:7:LYS:HA | 1:A:7:LYS:HG3 | 16 | 0.36 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 41 | 0.36 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 46 | 0.36 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 3 | 0.36 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 3 | 0.36 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 21 | 0.36 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 21 | 0.36 |
| (2,702) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 21 | 0.36 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 10 | 0.36 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 10 | 0.36 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 10 | 0.36 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 17 | 0.36 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 17 | 0.36 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 17 | 0.36 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 35 | 0.36 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 35 | 0.36 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 35 | 0.36 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.36 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.36 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 11 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 11 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 11 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 12 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 12 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 12 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 17 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 17 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 17 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 24 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 24 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 24 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 27 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 27 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 27 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 30 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 30 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 30 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 32 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 32 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 32 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 38 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 38 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 38 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 44 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 44 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 44 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 46 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 46 | 0.36 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 46 | 0.36 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 20 | 0.36 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 15 | 0.36 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 25 | 0.36 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 11 | 0.36 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 27 | 0.36 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 16 | 0.36 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 16 | 0.36 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 10 | 0.36 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 13 | 0.36 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 21 | 0.36 |
| (2,631) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 5 | 0.36 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 31 | 0.36 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 31 | 0.36 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 1 | 0.36 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 1 | 0.36 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 1 | 0.36 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 11 | 0.36 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 11 | 0.36 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 11 | 0.36 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 22 | 0.36 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 22 | 0.36 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 22 | 0.36 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 42 | 0.36 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 42 | 0.36 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 42 | 0.36 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.36 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.36 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.36 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 15 | 0.36 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 15 | 0.36 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 15 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 46 | 0.36 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 46 | 0.36 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 46 | 0.36 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 10 | 0.36 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 10 | 0.36 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 11 | 0.36 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 11 | 0.36 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 6 | 0.36 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 8 | 0.36 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 36 | 0.36 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 10 | 0.36 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 19 | 0.36 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 22 | 0.36 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 48 | 0.36 |
| (2,510) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HA | 10 | 0.36 |
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 44 | 0.36 |
| (2,507) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 2 | 0.36 |
| (2,476) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 9 | 0.36 |
| (2,473) | 1:A:7:LYS:HA | 1:A:7:LYS:HG3 | 16 | 0.36 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 20 | 0.36 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 10 | 0.36 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 10 | 0.36 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 11 | 0.36 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 11 | 0.36 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 6 | 0.36 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 8 | 0.36 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 36 | 0.36 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 0.36 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 11 | 0.36 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 10 | 0.36 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 19 | 0.36 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 22 | 0.36 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 48 | 0.36 |
| (2,428) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 5 | 0.36 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 41 | 0.36 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 46 | 0.36 |
| (2,390) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 21 | 0.36 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 16 | 0.36 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 16 | 0.36 |
| (2,379) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HA | 10 | 0.36 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 3 | 0.36 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 6 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 21 | 0.36 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 30 | 0.36 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 34 | 0.36 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 44 | 0.36 |
| (2,354) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 2 | 0.36 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 17 | 0.36 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 17 | 0.36 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 17 | 0.36 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 35 | 0.36 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 35 | 0.36 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 35 | 0.36 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 7 | 0.36 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 50 | 0.36 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 3 | 0.36 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 3 | 0.36 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 21 | 0.36 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 21 | 0.36 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 11 | 0.36 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 27 | 0.36 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.36 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 40 | 0.36 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 40 | 0.36 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 40 | 0.36 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 14 | 0.36 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 16 | 0.36 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 20 | 0.36 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 37 | 0.36 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 15 | 0.36 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 25 | 0.36 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 14 | 0.36 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 31 | 0.36 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 31 | 0.36 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:H | 42 | 0.36 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:H | 42 | 0.36 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2 | 9 | 0.36 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3 | 9 | 0.36 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 22 | 0.36 |
| (1,926) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 22 | 0.36 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 14 | 0.36 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 20 | 0.36 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 40 | 0.36 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 40 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 40 | 0.36 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 7 | 0.36 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 50 | 0.36 |
| (1,82) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB3 | 21 | 0.36 |
| (1,82) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB3 | 21 | 0.36 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 14 | 0.36 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 16 | 0.36 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.36 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 32 | 0.36 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 32 | 0.36 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 10 | 0.36 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 10 | 0.36 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 10 | 0.36 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 0.36 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 11 | 0.36 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 3 | 0.36 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 6 | 0.36 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 21 | 0.36 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 30 | 0.36 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 34 | 0.36 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 37 | 0.36 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 41 | 0.36 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 46 | 0.36 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 3 | 0.36 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 3 | 0.36 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 21 | 0.36 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 21 | 0.36 |
| (1,678) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 21 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 17 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 17 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 17 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 35 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 35 | 0.36 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 35 | 0.36 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 20 | 0.36 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 15 | 0.36 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 25 | 0.36 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 11 | 0.36 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 27 | 0.36 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 16 | 0.36 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 16 | 0.36 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 10 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 13 | 0.36 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 21 | 0.36 |
| (1,612) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 5 | 0.36 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 31 | 0.36 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 31 | 0.36 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 10 | 0.36 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 10 | 0.36 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 11 | 0.36 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 11 | 0.36 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 6 | 0.36 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 8 | 0.36 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 36 | 0.36 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 10 | 0.36 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 19 | 0.36 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 22 | 0.36 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 48 | 0.36 |
| (1,500) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HA | 10 | 0.36 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 44 | 0.36 |
| (1,497) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 2 | 0.36 |
| (1,466) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 9 | 0.36 |
| (1,463) | 1:A:7:LYS:HA | 1:A:7:LYS:HG3 | 16 | 0.36 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 49 | 0.36 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 35 | 0.36 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 35 | 0.36 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 10 | 0.36 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 26 | 0.36 |
| (1,262) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 26 | 0.36 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 3 | 0.36 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 45 | 0.36 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 5 | 0.36 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 13 | 0.36 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 21 | 0.36 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 34 | 0.36 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 35 | 0.36 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 4 | 0.36 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 4 | 0.36 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 4 | 0.36 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 19 | 0.36 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 19 | 0.36 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 19 | 0.36 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 23 | 0.36 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 23 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 23 | 0.36 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 20 | 0.36 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 20 | 0.36 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 20 | 0.36 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 37 | 0.36 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 37 | 0.36 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 37 | 0.36 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 4 | 0.36 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 25 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 1 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 1 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 1 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 1 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 2 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 2 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 2 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 2 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 3 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 3 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 3 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 3 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 4 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 4 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 4 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 4 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 5 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 5 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 5 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 5 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 6 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 6 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 6 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 6 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 7 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 7 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 7 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 7 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 8 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 8 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 8 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 8 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 9 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 9 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 9 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 9 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 10 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 10 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 10 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 10 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 11 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 11 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 11 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 11 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 12 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 12 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 12 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 12 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 13 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 13 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 13 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 13 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 14 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 14 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 14 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 14 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 15 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 15 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 15 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 15 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 16 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 16 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 16 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 16 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 17 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 17 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 17 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 17 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 18 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 18 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 18 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 18 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 19 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 19 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 19 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 19 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 20 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 20 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 20 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 20 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 21 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 21 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 21 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 21 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 22 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 22 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 22 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 22 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 23 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 23 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 23 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 23 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 24 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 24 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 24 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 24 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 25 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 25 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 25 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 25 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 26 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 26 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 26 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 26 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 27 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 27 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 27 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 27 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 28 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 28 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 28 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 28 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 29 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 29 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 29 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 29 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 30 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 30 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 30 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 30 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 31 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 31 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 31 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 31 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 32 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 32 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 32 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 32 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 33 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 33 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 33 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 33 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 34 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 34 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 34 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 34 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 35 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 35 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 35 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 35 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 36 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 36 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 36 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 36 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 37 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 37 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 37 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 37 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 38 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 38 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 38 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 38 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 39 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 39 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 39 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 39 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 40 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 40 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 40 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 40 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 41 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 41 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 41 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 41 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 42 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 42 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 42 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 42 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 43 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 43 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 43 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 43 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 44 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 44 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 44 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 44 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 45 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 45 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 45 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 45 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 46 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 46 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 46 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 46 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 47 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 47 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 47 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 47 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 48 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 48 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 48 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 48 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 49 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 49 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 49 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 49 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HB2 | 50 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 50 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:29:PRO:HG2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 50 | 0.36 |
| (1,1043) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 50 | 0.36 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 15 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 15 | 0.36 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 15 | 0.36 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 15 | 0.36 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 15 | 0.36 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 15 | 0.36 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 24 | 0.36 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 24 | 0.36 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 24 | 0.36 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 24 | 0.36 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 24 | 0.36 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 24 | 0.36 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 2 | 0.36 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 2 | 0.36 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 2 | 0.36 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 2 | 0.36 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 2 | 0.36 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 2 | 0.36 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 13 | 0.36 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 13 | 0.36 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 13 | 0.36 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 13 | 0.36 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 13 | 0.36 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 13 | 0.36 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 43 | 0.36 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 43 | 0.36 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 43 | 0.36 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 43 | 0.36 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 43 | 0.36 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 43 | 0.36 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 9 | 0.36 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 9 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 5 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 5 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 5 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 5 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 5 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 5 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 5 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 5 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 5 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 25 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 25 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 25 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 25 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 25 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 25 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 25 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 25 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 25 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 27 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 27 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 27 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 27 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 27 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 27 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 27 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 27 | 0.36 |
| (1,1031) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 27 | 0.36 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HG2 | 30 | 0.36 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HG2 | 30 | 0.36 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HG2 | 30 | 0.36 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.36 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.36 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.36 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 17 | 0.36 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 17 | 0.36 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 24 | 0.36 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 24 | 0.36 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 26 | 0.36 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 26 | 0.36 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 45 | 0.36 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 45 | 0.36 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 50 | 0.36 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 50 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 3 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 3 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 3 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 3 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 3 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 3 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 3 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 3 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 3 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 5 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 5 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 5 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 5 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 5 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 5 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 5 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 5 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 5 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 13 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 13 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 13 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 13 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 13 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 13 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 13 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 13 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 13 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 14 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 14 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 14 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 14 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 14 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 14 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 14 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 14 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 14 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 15 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 15 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 15 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 15 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 15 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 15 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 15 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 15 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 15 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 16 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 16 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 16 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 16 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 16 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 16 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 16 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 16 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 16 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 18 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 18 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 18 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 18 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 18 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 18 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 18 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 18 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 18 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 20 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 20 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 20 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 20 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 20 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 20 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 20 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 20 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 20 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 24 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 24 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 24 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 24 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 24 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 24 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 24 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 24 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 24 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 25 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 25 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 25 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 25 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 25 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 25 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 25 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 25 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 25 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 26 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 26 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 26 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 26 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 26 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 26 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 26 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 26 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 26 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 28 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 28 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 28 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 28 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 28 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 28 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 28 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 28 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 28 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 33 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 33 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 33 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 33 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 33 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 33 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 33 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 33 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 33 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 42 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 42 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 42 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 42 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 42 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 42 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 42 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 42 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 42 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG3 | 46 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 46 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 46 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 46 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HG3 | 1:A:25:GLN:HA | 46 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG3 | 46 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 46 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 46 | 0.36 |
| (1,1006) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 46 | 0.36 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:H | 2 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 2 | 0.36 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:H | 11 | 0.36 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 11 | 0.36 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:H | 15 | 0.36 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 15 | 0.36 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:H | 48 | 0.36 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 48 | 0.36 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 17 | 0.35 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 12 | 0.35 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.35 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 5 | 0.35 |
| (2,850) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 4 | 0.35 |
| (2,850) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 30 | 0.35 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 6 | 0.35 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 49 | 0.35 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.35 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 47 | 0.35 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 47 | 0.35 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 47 | 0.35 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 46 | 0.35 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 49 | 0.35 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 50 | 0.35 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 12 | 0.35 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 18 | 0.35 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 32 | 0.35 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 32 | 0.35 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 32 | 0.35 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 11 | 0.35 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 38 | 0.35 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 21 | 0.35 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 23 | 0.35 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 47 | 0.35 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 47 | 0.35 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 47 | 0.35 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 28 | 0.35 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 28 | 0.35 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 28 | 0.35 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.35 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 13 | 0.35 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 13 | 0.35 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 13 | 0.35 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 14 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 14 | 0.35 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 14 | 0.35 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 18 | 0.35 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 18 | 0.35 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 18 | 0.35 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 17 | 0.35 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 42 | 0.35 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 42 | 0.35 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 40 | 0.35 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 32 | 0.35 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 32 | 0.35 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 32 | 0.35 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 34 | 0.35 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 34 | 0.35 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 34 | 0.35 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 34 | 0.35 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 34 | 0.35 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 34 | 0.35 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 49 | 0.35 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 50 | 0.35 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 4 | 0.35 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 12 | 0.35 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 20 | 0.35 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 23 | 0.35 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 34 | 0.35 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 38 | 0.35 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 39 | 0.35 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 1 | 0.35 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 1 | 0.35 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 9 | 0.35 |
| (2,5) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 4 | 0.35 |
| (2,5) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 30 | 0.35 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 12 | 0.35 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 1 | 0.35 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 1 | 0.35 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 9 | 0.35 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.35 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 11 | 0.35 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 38 | 0.35 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 46 | 0.35 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 42 | 0.35 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 42 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 12 | 0.35 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 32 | 0.35 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 32 | 0.35 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 32 | 0.35 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 28 | 0.35 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 28 | 0.35 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 28 | 0.35 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 5 | 0.35 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 40 | 0.35 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.35 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 6 | 0.35 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 49 | 0.35 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 18 | 0.35 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 17 | 0.35 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 21 | 0.35 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 23 | 0.35 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 4 | 0.35 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 12 | 0.35 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 20 | 0.35 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 23 | 0.35 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 34 | 0.35 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 38 | 0.35 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 39 | 0.35 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 17 | 0.35 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:H | 10 | 0.35 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:H | 10 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 11 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 11 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 11 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 11 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 11 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 11 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 23 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 23 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 23 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 23 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 23 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 23 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 23 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 23 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 23 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 37 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 37 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 37 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 37 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 37 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 37 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 37 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 37 | 0.35 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 37 | 0.35 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 3 | 0.35 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 3 | 0.35 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2 | 5 | 0.35 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3 | 5 | 0.35 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2 | 26 | 0.35 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3 | 26 | 0.35 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2 | 30 | 0.35 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3 | 30 | 0.35 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2 | 41 | 0.35 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3 | 41 | 0.35 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 17 | 0.35 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 12 | 0.35 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.35 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 5 | 0.35 |
| (1,824) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 4 | 0.35 |
| (1,824) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 30 | 0.35 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 6 | 0.35 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 49 | 0.35 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.35 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 47 | 0.35 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 47 | 0.35 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 47 | 0.35 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 46 | 0.35 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 12 | 0.35 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 18 | 0.35 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 32 | 0.35 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 32 | 0.35 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 32 | 0.35 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 11 | 0.35 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 38 | 0.35 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 21 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 23 | 0.35 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 28 | 0.35 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 28 | 0.35 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 28 | 0.35 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 17 | 0.35 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 42 | 0.35 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 42 | 0.35 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 40 | 0.35 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 49 | 0.35 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 50 | 0.35 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 4 | 0.35 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 12 | 0.35 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 20 | 0.35 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 23 | 0.35 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 34 | 0.35 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 38 | 0.35 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 39 | 0.35 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 1 | 0.35 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 1 | 0.35 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 9 | 0.35 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 24 | 0.35 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 34 | 0.35 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 22 | 0.35 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 24 | 0.35 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 24 | 0.35 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 24 | 0.35 |
| (1,230) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:25:GLN:HG3 | 23 | 0.35 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 32 | 0.35 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 6 | 0.35 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 12 | 0.35 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 16 | 0.35 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 24 | 0.35 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 32 | 0.35 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 40 | 0.35 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 14 | 0.35 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 14 | 0.35 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 14 | 0.35 |
| (1,151) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB3 | 33 | 0.35 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 16 | 0.35 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 7 | 0.35 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 14 | 0.35 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 15 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 16 | 0.35 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 23 | 0.35 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 39 | 0.35 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 45 | 0.35 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 8 | 0.35 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 8 | 0.35 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 8 | 0.35 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 8 | 0.35 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 8 | 0.35 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 8 | 0.35 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 29 | 0.35 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 29 | 0.35 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 29 | 0.35 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 29 | 0.35 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 29 | 0.35 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 29 | 0.35 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 19 | 0.35 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 19 | 0.35 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 19 | 0.35 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 19 | 0.35 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 19 | 0.35 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 19 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 1 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 1 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 1 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 1 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 1 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 1 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 4 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 4 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 4 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 4 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 4 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 4 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 11 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 11 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 11 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 17 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 17 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 17 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 17 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 17 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 17 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 35 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 35 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 35 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 35 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 35 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 35 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 48 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 48 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 48 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 48 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 48 | 0.35 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 48 | 0.35 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 21 | 0.35 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 21 | 0.35 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 28 | 0.35 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 28 | 0.35 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 44 | 0.35 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 44 | 0.35 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:H | 40 | 0.35 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 40 | 0.35 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 8 | 0.34 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 38 | 0.34 |
| (2,912) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB3 | 13 | 0.34 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 10 | 0.34 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.34 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 22 | 0.34 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.34 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 3 | 0.34 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 18 | 0.34 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 22 | 0.34 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 23 | 0.34 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 28 | 0.34 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 37 | 0.34 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 40 | 0.34 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 12 | 0.34 |
| (2,850) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 9 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 8 | 0.34 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 12 | 0.34 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 17 | 0.34 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.34 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 12 | 0.34 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 32 | 0.34 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 34 | 0.34 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 35 | 0.34 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 41 | 0.34 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 45 | 0.34 |
| (2,807) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 8 | 0.34 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 38 | 0.34 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 43 | 0.34 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 46 | 0.34 |
| (2,745) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 35 | 0.34 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 24 | 0.34 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 24 | 0.34 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 24 | 0.34 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 7 | 0.34 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 7 | 0.34 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 14 | 0.34 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 14 | 0.34 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 22 | 0.34 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 22 | 0.34 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 14 | 0.34 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 19 | 0.34 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 27 | 0.34 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 33 | 0.34 |
| (2,702) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 24 | 0.34 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 15 | 0.34 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 24 | 0.34 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 29 | 0.34 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 8 | 0.34 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 8 | 0.34 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 8 | 0.34 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.34 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.34 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.34 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 4 | 0.34 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 4 | 0.34 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 4 | 0.34 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 21 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 21 | 0.34 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 21 | 0.34 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 33 | 0.34 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 33 | 0.34 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 33 | 0.34 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 28 | 0.34 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 41 | 0.34 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 4 | 0.34 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 5 | 0.34 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 7 | 0.34 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 17 | 0.34 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 19 | 0.34 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 34 | 0.34 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 37 | 0.34 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 40 | 0.34 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 8 | 0.34 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 42 | 0.34 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 47 | 0.34 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 47 | 0.34 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 47 | 0.34 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 24 | 0.34 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 24 | 0.34 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 24 | 0.34 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 40 | 0.34 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 40 | 0.34 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 40 | 0.34 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 2 | 0.34 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 9 | 0.34 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 10 | 0.34 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 13 | 0.34 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 15 | 0.34 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 16 | 0.34 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 18 | 0.34 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 19 | 0.34 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 30 | 0.34 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 33 | 0.34 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 40 | 0.34 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 41 | 0.34 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 42 | 0.34 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 47 | 0.34 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 48 | 0.34 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 24 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 24 | 0.34 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 31 | 0.34 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 31 | 0.34 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 43 | 0.34 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 42 | 0.34 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 17 | 0.34 |
| (2,5) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 9 | 0.34 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 7 | 0.34 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 7 | 0.34 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 14 | 0.34 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 14 | 0.34 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 22 | 0.34 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 22 | 0.34 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 24 | 0.34 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 24 | 0.34 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 31 | 0.34 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 31 | 0.34 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 43 | 0.34 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 10 | 0.34 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.34 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 22 | 0.34 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.34 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 38 | 0.34 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 43 | 0.34 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 46 | 0.34 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 42 | 0.34 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 17 | 0.34 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 42 | 0.34 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 14 | 0.34 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 19 | 0.34 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 27 | 0.34 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 33 | 0.34 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 12 | 0.34 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 32 | 0.34 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 34 | 0.34 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 35 | 0.34 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 41 | 0.34 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 45 | 0.34 |
| (2,390) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 24 | 0.34 |
| (2,377) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 8 | 0.34 |
| (2,367) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 35 | 0.34 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 24 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 24 | 0.34 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 24 | 0.34 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 8 | 0.34 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 8 | 0.34 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 8 | 0.34 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 12 | 0.34 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 4 | 0.34 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 5 | 0.34 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 7 | 0.34 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 17 | 0.34 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 19 | 0.34 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 34 | 0.34 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 37 | 0.34 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 40 | 0.34 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.34 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 8 | 0.34 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 12 | 0.34 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 17 | 0.34 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 3 | 0.34 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 18 | 0.34 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 22 | 0.34 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 23 | 0.34 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 28 | 0.34 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 37 | 0.34 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 40 | 0.34 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 28 | 0.34 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 41 | 0.34 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 15 | 0.34 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 24 | 0.34 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 29 | 0.34 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 2 | 0.34 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 9 | 0.34 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 10 | 0.34 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 13 | 0.34 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 15 | 0.34 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 16 | 0.34 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 18 | 0.34 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 19 | 0.34 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 30 | 0.34 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 33 | 0.34 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 40 | 0.34 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 41 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 42 | 0.34 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 47 | 0.34 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 48 | 0.34 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 38 | 0.34 |
| (2,104) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB3 | 13 | 0.34 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 3 | 0.34 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 3 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 1 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 1 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 1 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 1 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 1 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 1 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 1 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 1 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 1 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 31 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 31 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 31 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 31 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 31 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 31 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 31 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 31 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 31 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 44 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 44 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 44 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 44 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 44 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 44 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 44 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 44 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 44 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 48 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 48 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 48 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 48 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 48 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 48 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 48 | 0.34 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 48 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 48 | 0.34 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 27 | 0.34 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 27 | 0.34 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2 | 27 | 0.34 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3 | 27 | 0.34 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2 | 35 | 0.34 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3 | 35 | 0.34 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 38 | 0.34 |
| (1,886) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB3 | 13 | 0.34 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 10 | 0.34 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.34 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 22 | 0.34 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.34 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 3 | 0.34 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 18 | 0.34 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 22 | 0.34 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 23 | 0.34 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 28 | 0.34 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 37 | 0.34 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 40 | 0.34 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 12 | 0.34 |
| (1,824) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 9 | 0.34 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 8 | 0.34 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 12 | 0.34 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 17 | 0.34 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.34 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 12 | 0.34 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 32 | 0.34 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 34 | 0.34 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 35 | 0.34 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 41 | 0.34 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 45 | 0.34 |
| (1,782) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 8 | 0.34 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 38 | 0.34 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 43 | 0.34 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 46 | 0.34 |
| (1,720) | 1:A:26:MET:HG3 | 1:A:26:MET:HA | 35 | 0.34 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 24 | 0.34 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 24 | 0.34 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 24 | 0.34 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 7 | 0.34 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 7 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 14 | 0.34 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 14 | 0.34 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 22 | 0.34 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 22 | 0.34 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 14 | 0.34 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 19 | 0.34 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 27 | 0.34 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 33 | 0.34 |
| (1,678) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 24 | 0.34 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 15 | 0.34 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 24 | 0.34 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 29 | 0.34 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 8 | 0.34 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 8 | 0.34 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 8 | 0.34 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 28 | 0.34 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 41 | 0.34 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 4 | 0.34 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 5 | 0.34 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 7 | 0.34 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 17 | 0.34 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 19 | 0.34 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 34 | 0.34 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 37 | 0.34 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 40 | 0.34 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 8 | 0.34 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 42 | 0.34 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 2 | 0.34 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 9 | 0.34 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 10 | 0.34 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 13 | 0.34 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 15 | 0.34 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 16 | 0.34 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 18 | 0.34 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 19 | 0.34 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 30 | 0.34 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 33 | 0.34 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 40 | 0.34 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 41 | 0.34 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 42 | 0.34 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 47 | 0.34 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 48 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 24 | 0.34 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 24 | 0.34 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 31 | 0.34 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 31 | 0.34 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 43 | 0.34 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 42 | 0.34 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 17 | 0.34 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 11 | 0.34 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 11 | 0.34 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 17 | 0.34 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 37 | 0.34 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 42 | 0.34 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 45 | 0.34 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 50 | 0.34 |
| (1,189) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 23 | 0.34 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 49 | 0.34 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 49 | 0.34 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 49 | 0.34 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.34 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.34 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.34 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 7 | 0.34 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 7 | 0.34 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 7 | 0.34 |
| (1,150) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 14 | 0.34 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 41 | 0.34 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 49 | 0.34 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 7 | 0.34 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 7 | 0.34 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 7 | 0.34 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 7 | 0.34 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 7 | 0.34 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 7 | 0.34 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 23 | 0.34 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 23 | 0.34 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 23 | 0.34 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 23 | 0.34 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 23 | 0.34 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 23 | 0.34 |
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 46 | 0.34 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HE21 | 46 | 0.34 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:H | 46 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1041) | 1:A:22:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 46 | 0.34 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HE21 | 46 | 0.34 |
| (1,1041) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 46 | 0.34 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 46 | 0.34 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 46 | 0.34 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 46 | 0.34 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 46 | 0.34 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 46 | 0.34 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 46 | 0.34 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 11 | 0.34 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 11 | 0.34 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 11 | 0.34 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 11 | 0.34 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 11 | 0.34 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 11 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 19 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 19 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 19 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 19 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 19 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 19 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 30 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 30 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 30 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 30 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 30 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 30 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 31 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 31 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 31 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 31 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 31 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 31 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 32 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 32 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 32 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 32 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 32 | 0.34 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 32 | 0.34 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 15 | 0.34 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 15 | 0.34 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 25 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 25 | 0.34 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 4 | 0.34 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 4 | 0.34 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 13 | 0.34 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 13 | 0.34 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 32 | 0.34 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 32 | 0.34 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 14 | 0.34 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 14 | 0.34 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 14 | 0.34 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 14 | 0.34 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 14 | 0.34 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 14 | 0.34 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 35 | 0.34 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 35 | 0.34 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 36 | 0.34 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 36 | 0.34 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:H | 14 | 0.34 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 14 | 0.34 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:H | 39 | 0.34 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 39 | 0.34 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:H | 47 | 0.34 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 47 | 0.34 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 14 | 0.33 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 31 | 0.33 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 22 | 0.33 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 35 | 0.33 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 35 | 0.33 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.33 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 5 | 0.33 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 34 | 0.33 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 34 | 0.33 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 34 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 1 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 2 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 4 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 5 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 6 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 7 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 8 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 9 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 10 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 11 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 12 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 13 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 14 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 15 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 16 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 17 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 19 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 20 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 21 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 24 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 25 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 26 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 27 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 29 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 30 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 31 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 32 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 33 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 34 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 35 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 36 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 38 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 39 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 41 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 42 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 43 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 44 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 45 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 46 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 47 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 48 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 49 | 0.33 |
| (2,871) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 50 | 0.33 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 3 | 0.33 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 9 | 0.33 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 20 | 0.33 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 28 | 0.33 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 30 | 0.33 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 37 | 0.33 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 37 | 0.33 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.33 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.33 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.33 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 31 | 0.33 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 49 | 0.33 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 43 | 0.33 |
| (2,768) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 49 | 0.33 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 13 | 0.33 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 33 | 0.33 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 36 | 0.33 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 49 | 0.33 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 3 | 0.33 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 1 | 0.33 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 1 | 0.33 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 1 | 0.33 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 31 | 0.33 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 31 | 0.33 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 31 | 0.33 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 36 | 0.33 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 36 | 0.33 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 36 | 0.33 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 40 | 0.33 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 40 | 0.33 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 40 | 0.33 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 35 | 0.33 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 30 | 0.33 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 30 | 0.33 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 49 | 0.33 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 49 | 0.33 |
| (2,702) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 33 | 0.33 |
| (2,702) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 39 | 0.33 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 10 | 0.33 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 10 | 0.33 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 10 | 0.33 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 45 | 0.33 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 45 | 0.33 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 45 | 0.33 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 48 | 0.33 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 48 | 0.33 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 48 | 0.33 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.33 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.33 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 3 | 0.33 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 3 | 0.33 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 3 | 0.33 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 25 | 0.33 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 25 | 0.33 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 25 | 0.33 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 26 | 0.33 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 26 | 0.33 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 26 | 0.33 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 50 | 0.33 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 50 | 0.33 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 50 | 0.33 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 1 | 0.33 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 1 | 0.33 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 1 | 0.33 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 13 | 0.33 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 26 | 0.33 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 31 | 0.33 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 38 | 0.33 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 2 | 0.33 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 13 | 0.33 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 20 | 0.33 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 20 | 0.33 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 38 | 0.33 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 38 | 0.33 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 5 | 0.33 |
| (2,588) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 3 | 0.33 |
| (2,588) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 3 | 0.33 |
| (2,588) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 3 | 0.33 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 44 | 0.33 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 44 | 0.33 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 44 | 0.33 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 48 | 0.33 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 48 | 0.33 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 48 | 0.33 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 49 | 0.33 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 49 | 0.33 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 49 | 0.33 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 22 | 0.33 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 22 | 0.33 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 22 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 1 | 0.33 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 1 | 0.33 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 1 | 0.33 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 1 | 0.33 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 32 | 0.33 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 7 | 0.33 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 29 | 0.33 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 32 | 0.33 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 43 | 0.33 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 49 | 0.33 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 9 | 0.33 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 9 | 0.33 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 17 | 0.33 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 10 | 0.33 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 12 | 0.33 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 19 | 0.33 |
| (2,510) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HA | 43 | 0.33 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 1 | 0.33 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 32 | 0.33 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 35 | 0.33 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 9 | 0.33 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 9 | 0.33 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 17 | 0.33 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.33 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 13 | 0.33 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 33 | 0.33 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 36 | 0.33 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 10 | 0.33 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 12 | 0.33 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 19 | 0.33 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 49 | 0.33 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 35 | 0.33 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 31 | 0.33 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 49 | 0.33 |
| (2,390) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 33 | 0.33 |
| (2,390) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 39 | 0.33 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 20 | 0.33 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 20 | 0.33 |
| (2,379) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HA | 43 | 0.33 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 1 | 0.33 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 1 | 0.33 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 1 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 31 | 0.33 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 31 | 0.33 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 31 | 0.33 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 36 | 0.33 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 36 | 0.33 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 36 | 0.33 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 40 | 0.33 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 40 | 0.33 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 40 | 0.33 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 10 | 0.33 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 10 | 0.33 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 10 | 0.33 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 45 | 0.33 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 45 | 0.33 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 45 | 0.33 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 48 | 0.33 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 48 | 0.33 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 48 | 0.33 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 3 | 0.33 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 9 | 0.33 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 20 | 0.33 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 28 | 0.33 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 30 | 0.33 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 30 | 0.33 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 30 | 0.33 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 49 | 0.33 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 49 | 0.33 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 37 | 0.33 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 37 | 0.33 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.33 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.33 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.33 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.33 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 34 | 0.33 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 34 | 0.33 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 34 | 0.33 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 38 | 0.33 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 38 | 0.33 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 13 | 0.33 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 26 | 0.33 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 31 | 0.33 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 38 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 1 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 2 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 4 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 5 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 6 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 7 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 8 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 9 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 10 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 11 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 12 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 13 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 14 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 15 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 16 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 17 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 19 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 20 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 21 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 24 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 25 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 26 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 27 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 29 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 30 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 31 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 32 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 33 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 34 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 35 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 36 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 38 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 39 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 41 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 42 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 43 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 44 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 45 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 46 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 47 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 48 | 0.33 |
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 49 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,189) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 50 | 0.33 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 3 | 0.33 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 2 | 0.33 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 13 | 0.33 |
| (2,164) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 49 | 0.33 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 7 | 0.33 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 29 | 0.33 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 32 | 0.33 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 43 | 0.33 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 49 | 0.33 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 14 | 0.33 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 31 | 0.33 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 22 | 0.33 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 35 | 0.33 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 43 | 0.33 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 35 | 0.33 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 35 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 6 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 6 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 6 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 6 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 6 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 6 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 6 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 6 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 6 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 8 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 8 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 8 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 8 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 8 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 8 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 8 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 8 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 8 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 12 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 12 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 12 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 12 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 12 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 12 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 12 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 12 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 12 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 17 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 17 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 17 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 17 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 17 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 17 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 17 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 17 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 17 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 19 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 19 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 19 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 19 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 19 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 19 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 19 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 19 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 19 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 30 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 30 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 30 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 30 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 30 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 30 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 30 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 30 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 30 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 32 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 32 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 32 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 32 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 32 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 32 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 32 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 32 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 32 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 34 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 34 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 34 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 34 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 34 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 34 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 34 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 34 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 34 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 35 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 35 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 35 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 35 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 35 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 35 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 35 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 35 | 0.33 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 35 | 0.33 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2 | 17 | 0.33 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3 | 17 | 0.33 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2 | 25 | 0.33 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3 | 25 | 0.33 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 14 | 0.33 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 31 | 0.33 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 22 | 0.33 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 35 | 0.33 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 35 | 0.33 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.33 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 5 | 0.33 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 34 | 0.33 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 34 | 0.33 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 34 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 1 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 2 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 4 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 5 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 6 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 7 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 8 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 9 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 10 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 11 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 12 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 13 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 14 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 15 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 16 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 17 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 19 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 20 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 21 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 24 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 25 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 26 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 27 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 29 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 30 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 31 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 32 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 33 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 34 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 35 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 36 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 38 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 39 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 41 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 42 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 43 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 44 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 45 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 46 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 47 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 48 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 49 | 0.33 |
| (1,845) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:HB3 | 50 | 0.33 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 3 | 0.33 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 9 | 0.33 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 20 | 0.33 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 28 | 0.33 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 30 | 0.33 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 37 | 0.33 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 37 | 0.33 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.33 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.33 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.33 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.33 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 31 | 0.33 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 49 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 43 | 0.33 |
| (1,743) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 49 | 0.33 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 13 | 0.33 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 33 | 0.33 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 36 | 0.33 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 49 | 0.33 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 3 | 0.33 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 1 | 0.33 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 1 | 0.33 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 1 | 0.33 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 31 | 0.33 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 31 | 0.33 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 31 | 0.33 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 36 | 0.33 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 36 | 0.33 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 36 | 0.33 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 40 | 0.33 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 40 | 0.33 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 40 | 0.33 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 35 | 0.33 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 30 | 0.33 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 30 | 0.33 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 49 | 0.33 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 49 | 0.33 |
| (1,678) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 33 | 0.33 |
| (1,678) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 39 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 10 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 10 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 10 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 45 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 45 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 45 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 48 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 48 | 0.33 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 48 | 0.33 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 13 | 0.33 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 26 | 0.33 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 31 | 0.33 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 38 | 0.33 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 2 | 0.33 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 13 | 0.33 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 20 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 20 | 0.33 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 38 | 0.33 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 38 | 0.33 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 1 | 0.33 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 1 | 0.33 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 1 | 0.33 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 1 | 0.33 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 32 | 0.33 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 7 | 0.33 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 29 | 0.33 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 32 | 0.33 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 43 | 0.33 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 49 | 0.33 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 9 | 0.33 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 9 | 0.33 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 17 | 0.33 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 10 | 0.33 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 12 | 0.33 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 19 | 0.33 |
| (1,500) | 1:A:27:CYS:HB2 | 1:A:27:CYS:HA | 43 | 0.33 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 15 | 0.33 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 6 | 0.33 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 6 | 0.33 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 6 | 0.33 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 42 | 0.33 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 26 | 0.33 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 42 | 0.33 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 40 | 0.33 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 40 | 0.33 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 40 | 0.33 |
| (1,230) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:25:GLN:HG3 | 48 | 0.33 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 6 | 0.33 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 37 | 0.33 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 41 | 0.33 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 43 | 0.33 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 15 | 0.33 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 22 | 0.33 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 22 | 0.33 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 22 | 0.33 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 46 | 0.33 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 46 | 0.33 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 46 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 28 | 0.33 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 30 | 0.33 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 35 | 0.33 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 44 | 0.33 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 44 | 0.33 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 44 | 0.33 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 44 | 0.33 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 44 | 0.33 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 44 | 0.33 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 21 | 0.33 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 21 | 0.33 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 21 | 0.33 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 21 | 0.33 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 21 | 0.33 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 21 | 0.33 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 32 | 0.33 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 32 | 0.33 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 32 | 0.33 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 32 | 0.33 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 32 | 0.33 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 32 | 0.33 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 34 | 0.33 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 34 | 0.33 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 34 | 0.33 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 34 | 0.33 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 34 | 0.33 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 34 | 0.33 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 1 | 0.33 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 1 | 0.33 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 1 | 0.33 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 1 | 0.33 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 1 | 0.33 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 1 | 0.33 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 42 | 0.33 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 42 | 0.33 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 42 | 0.33 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 42 | 0.33 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 42 | 0.33 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 42 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 6 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 6 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 6 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 6 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 6 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 6 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 12 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 12 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 12 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 12 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 12 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 12 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 14 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 14 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 14 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 14 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 14 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 14 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 21 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 21 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 21 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 21 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 21 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 21 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 34 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 34 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 34 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 34 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 34 | 0.33 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 34 | 0.33 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 17 | 0.33 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 17 | 0.33 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 38 | 0.33 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 38 | 0.33 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 38 | 0.33 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 38 | 0.33 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 42 | 0.33 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 42 | 0.33 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 42 | 0.33 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 42 | 0.33 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 43 | 0.33 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 43 | 0.33 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 49 | 0.32 |
| (2,945) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB2 | 18 | 0.32 |
| (2,945) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB2 | 18 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 31 | 0.32 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 36 | 0.32 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 46 | 0.32 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 32 | 0.32 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 40 | 0.32 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 49 | 0.32 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 30 | 0.32 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 30 | 0.32 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.32 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 8 | 0.32 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 11 | 0.32 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 31 | 0.32 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 44 | 0.32 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 45 | 0.32 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 9 | 0.32 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 10 | 0.32 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 12 | 0.32 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 14 | 0.32 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 18 | 0.32 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 21 | 0.32 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 22 | 0.32 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 32 | 0.32 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 38 | 0.32 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 39 | 0.32 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 49 | 0.32 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 50 | 0.32 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 10 | 0.32 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 36 | 0.32 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 43 | 0.32 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.32 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.32 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.32 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.32 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 35 | 0.32 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 35 | 0.32 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 35 | 0.32 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 5 | 0.32 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 48 | 0.32 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 50 | 0.32 |
| (2,800) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 32 | 0.32 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 47 | 0.32 |
| (2,794) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 40 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 21 | 0.32 |
| (2,768) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 32 | 0.32 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 3 | 0.32 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 29 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 4 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 4 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 4 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 14 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 14 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 14 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 23 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 23 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 23 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 25 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 25 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 25 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 38 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 38 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 38 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 41 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 41 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 41 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 49 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 49 | 0.32 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 49 | 0.32 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 39 | 0.32 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 33 | 0.32 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 33 | 0.32 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 6 | 0.32 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 30 | 0.32 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 37 | 0.32 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 39 | 0.32 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.32 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.32 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.32 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 35 | 0.32 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 35 | 0.32 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 35 | 0.32 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 30 | 0.32 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 30 | 0.32 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 30 | 0.32 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.32 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 8 | 0.32 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 8 | 0.32 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 8 | 0.32 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 10 | 0.32 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 10 | 0.32 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 10 | 0.32 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 45 | 0.32 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 45 | 0.32 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 45 | 0.32 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 8 | 0.32 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 15 | 0.32 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 29 | 0.32 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 32 | 0.32 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 36 | 0.32 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 1 | 0.32 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 9 | 0.32 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 16 | 0.32 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 20 | 0.32 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 21 | 0.32 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 24 | 0.32 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 29 | 0.32 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 33 | 0.32 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 35 | 0.32 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 46 | 0.32 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 48 | 0.32 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 7 | 0.32 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 7 | 0.32 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 48 | 0.32 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 48 | 0.32 |
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 49 | 0.32 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 32 | 0.32 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 40 | 0.32 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 49 | 0.32 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 26 | 0.32 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 26 | 0.32 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 26 | 0.32 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 29 | 0.32 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 29 | 0.32 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 29 | 0.32 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 33 | 0.32 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 33 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 33 | 0.32 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 47 | 0.32 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 1 | 0.32 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 3 | 0.32 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 5 | 0.32 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 8 | 0.32 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 11 | 0.32 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 17 | 0.32 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 21 | 0.32 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 22 | 0.32 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 24 | 0.32 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 25 | 0.32 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 26 | 0.32 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 27 | 0.32 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 28 | 0.32 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 35 | 0.32 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 36 | 0.32 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 37 | 0.32 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 44 | 0.32 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 45 | 0.32 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 46 | 0.32 |
| (2,537) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 37 | 0.32 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 28 | 0.32 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 37 | 0.32 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 47 | 0.32 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 37 | 0.32 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 37 | 0.32 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 37 | 0.32 |
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 25 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 1 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 2 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 3 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 4 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 5 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 6 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 7 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 8 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 9 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 10 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 11 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 12 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 13 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 14 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 15 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 16 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 17 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 18 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 19 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 20 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 21 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 22 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 23 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 24 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 25 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 26 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 27 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 28 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 29 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 30 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 31 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 32 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 33 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 34 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 35 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 36 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 37 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 38 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 39 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 40 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 41 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 42 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 43 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 44 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 45 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 46 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 47 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 48 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 49 | 0.32 |
| (2,499) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 50 | 0.32 |
| (2,461) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 40 | 0.32 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 28 | 0.32 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 37 | 0.32 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 47 | 0.32 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 3 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 37 | 0.32 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 37 | 0.32 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 37 | 0.32 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 39 | 0.32 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 5 | 0.32 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 48 | 0.32 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 50 | 0.32 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 7 | 0.32 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 7 | 0.32 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 48 | 0.32 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 48 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 4 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 4 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 4 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 14 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 14 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 14 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 23 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 23 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 23 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 25 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 25 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 25 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 38 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 38 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 38 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 41 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 41 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 41 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 49 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 49 | 0.32 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 49 | 0.32 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 25 | 0.32 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 30 | 0.32 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 30 | 0.32 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 30 | 0.32 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.32 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 8 | 0.32 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 11 | 0.32 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 31 | 0.32 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 44 | 0.32 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 45 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 30 | 0.32 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 30 | 0.32 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 33 | 0.32 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 33 | 0.32 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 9 | 0.32 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 10 | 0.32 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 12 | 0.32 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 14 | 0.32 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 18 | 0.32 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 21 | 0.32 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 22 | 0.32 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 32 | 0.32 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 38 | 0.32 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 39 | 0.32 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 49 | 0.32 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 50 | 0.32 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 1 | 0.32 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 9 | 0.32 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 16 | 0.32 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 20 | 0.32 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 21 | 0.32 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 24 | 0.32 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 29 | 0.32 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 33 | 0.32 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 35 | 0.32 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 46 | 0.32 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 48 | 0.32 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.32 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 10 | 0.32 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 36 | 0.32 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 43 | 0.32 |
| (2,226) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 37 | 0.32 |
| (2,221) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 32 | 0.32 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 8 | 0.32 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 15 | 0.32 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 29 | 0.32 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 32 | 0.32 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 29 | 0.32 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 36 | 0.32 |
| (2,164) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 32 | 0.32 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 6 | 0.32 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 30 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 37 | 0.32 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 39 | 0.32 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 1 | 0.32 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 3 | 0.32 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 5 | 0.32 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 8 | 0.32 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 11 | 0.32 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 17 | 0.32 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 21 | 0.32 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 22 | 0.32 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 24 | 0.32 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 25 | 0.32 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 26 | 0.32 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 27 | 0.32 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 28 | 0.32 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 35 | 0.32 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 36 | 0.32 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 37 | 0.32 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 44 | 0.32 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 45 | 0.32 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 46 | 0.32 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 31 | 0.32 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 36 | 0.32 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 46 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 1 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 2 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 3 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 4 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 5 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 6 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 7 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 8 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 9 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 10 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 11 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 12 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 13 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 14 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 15 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 16 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 17 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 18 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 19 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 20 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 21 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 22 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 23 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 24 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 25 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 26 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 27 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 28 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 29 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 30 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 31 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 32 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 33 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 34 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 35 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 36 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 37 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 38 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 39 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 40 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 41 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 42 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 43 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 44 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 45 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 46 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 47 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 48 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 49 | 0.32 |
| (2,12) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 50 | 0.32 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 21 | 0.32 |
| (2,106) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB2 | 18 | 0.32 |
| (2,106) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB2 | 18 | 0.32 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:H | 40 | 0.32 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:H | 40 | 0.32 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 25 | 0.32 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 25 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 2 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 2 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 2 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 2 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 2 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 2 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 2 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 2 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 2 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 3 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 3 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 3 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 3 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 3 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 3 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 3 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 3 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 3 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 7 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 7 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 7 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 7 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 7 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 7 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 7 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 7 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 7 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 9 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 9 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 9 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 9 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 9 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 9 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 9 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 10 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 10 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 10 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 10 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 10 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 10 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 10 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 10 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 10 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 13 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 13 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 13 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 13 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 13 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 13 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 13 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 13 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 13 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 14 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 14 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 14 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 14 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 14 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 14 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 14 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 14 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 14 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 16 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 16 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 16 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 16 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 16 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 16 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 16 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 16 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 16 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 21 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 21 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 21 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 21 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 21 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 21 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 21 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 21 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 21 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 24 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 24 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 24 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 24 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 24 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 24 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 24 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 24 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 24 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 25 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 25 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 25 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 25 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 25 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 25 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 25 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 25 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 25 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 26 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 26 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 26 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 26 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 26 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 26 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 26 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 26 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 26 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 28 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 28 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 28 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 28 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 28 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 28 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 28 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 28 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 28 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 33 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 33 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 33 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 33 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 33 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 33 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 33 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 33 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 33 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 36 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 36 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 36 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 36 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 36 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 36 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 36 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 36 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 36 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 39 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 39 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 39 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 39 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 39 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 39 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 39 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 39 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 39 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 41 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 41 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 41 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 41 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 41 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 41 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 41 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 41 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 41 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 42 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 42 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 42 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 42 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 42 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 42 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 42 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 42 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 42 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 43 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 43 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 43 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 43 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 43 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 43 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 43 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 43 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 43 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 45 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 45 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 45 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 45 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 45 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 45 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 45 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 45 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 45 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 46 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 46 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 46 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 46 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 46 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 46 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 46 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 46 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 46 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 47 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 47 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 47 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 47 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 47 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 47 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 47 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 47 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 47 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 49 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 49 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 49 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 49 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 49 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 49 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 49 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 49 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 49 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 50 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 50 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 50 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 50 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 50 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 50 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 50 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 50 | 0.32 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 50 | 0.32 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2 | 50 | 0.32 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3 | 50 | 0.32 |
| (1,919) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB2 | 18 | 0.32 |
| (1,919) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB2 | 18 | 0.32 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 31 | 0.32 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 36 | 0.32 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 46 | 0.32 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 32 | 0.32 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 40 | 0.32 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 49 | 0.32 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 30 | 0.32 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 30 | 0.32 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.32 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 8 | 0.32 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 11 | 0.32 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 31 | 0.32 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 44 | 0.32 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 45 | 0.32 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 9 | 0.32 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 10 | 0.32 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 12 | 0.32 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 14 | 0.32 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 18 | 0.32 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 21 | 0.32 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 22 | 0.32 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 32 | 0.32 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 38 | 0.32 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 39 | 0.32 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 49 | 0.32 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 50 | 0.32 |
| (1,82) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB3 | 26 | 0.32 |
| (1,82) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB3 | 26 | 0.32 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 10 | 0.32 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 36 | 0.32 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 43 | 0.32 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.32 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.32 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.32 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 35 | 0.32 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 35 | 0.32 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 35 | 0.32 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 5 | 0.32 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 48 | 0.32 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 50 | 0.32 |
| (1,775) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 32 | 0.32 |
| (1,769) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 40 | 0.32 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 21 | 0.32 |
| (1,743) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 32 | 0.32 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 3 | 0.32 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 29 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 4 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 4 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 4 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 14 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 14 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 14 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 23 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 23 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 23 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 25 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 25 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 25 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 38 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 38 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 38 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 41 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 41 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 41 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 49 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 49 | 0.32 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 49 | 0.32 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 39 | 0.32 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 33 | 0.32 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 33 | 0.32 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 6 | 0.32 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 30 | 0.32 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 37 | 0.32 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 39 | 0.32 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 30 | 0.32 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 30 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 30 | 0.32 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 8 | 0.32 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 15 | 0.32 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 29 | 0.32 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 32 | 0.32 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 36 | 0.32 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 1 | 0.32 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 9 | 0.32 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 16 | 0.32 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 20 | 0.32 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 21 | 0.32 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 24 | 0.32 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 29 | 0.32 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 33 | 0.32 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 35 | 0.32 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 46 | 0.32 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 48 | 0.32 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 7 | 0.32 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 7 | 0.32 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 48 | 0.32 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 48 | 0.32 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 49 | 0.32 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 47 | 0.32 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 1 | 0.32 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 3 | 0.32 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 5 | 0.32 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 8 | 0.32 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 11 | 0.32 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 17 | 0.32 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 21 | 0.32 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 22 | 0.32 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 24 | 0.32 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 25 | 0.32 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 26 | 0.32 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 27 | 0.32 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 28 | 0.32 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 35 | 0.32 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 36 | 0.32 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 37 | 0.32 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 44 | 0.32 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 45 | 0.32 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 46 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,527) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 37 | 0.32 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 28 | 0.32 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 37 | 0.32 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 47 | 0.32 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 37 | 0.32 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 37 | 0.32 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 37 | 0.32 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 25 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 1 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 2 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 3 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 4 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 5 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 6 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 7 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 8 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 9 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 10 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 11 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 12 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 13 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 14 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 15 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 16 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 17 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 18 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 19 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 20 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 21 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 22 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 23 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 24 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 25 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 26 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 27 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 28 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 29 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 30 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 31 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 32 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 33 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 34 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 35 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 36 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 37 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 38 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 39 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 40 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 41 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 42 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 43 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 44 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 45 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 46 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 47 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 48 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 49 | 0.32 |
| (1,489) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 50 | 0.32 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 34 | 0.32 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 36 | 0.32 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 36 | 0.32 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 29 | 0.32 |
| (1,262) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 22 | 0.32 |
| (1,230) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:25:GLN:HG3 | 31 | 0.32 |
| (1,230) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:25:GLN:HG3 | 37 | 0.32 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 27 | 0.32 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 31 | 0.32 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 36 | 0.32 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 42 | 0.32 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 49 | 0.32 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 14 | 0.32 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 31 | 0.32 |
| (1,196) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:HA | 18 | 0.32 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 11 | 0.32 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 11 | 0.32 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 11 | 0.32 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 35 | 0.32 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 35 | 0.32 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 35 | 0.32 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 43 | 0.32 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 43 | 0.32 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 43 | 0.32 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 11 | 0.32 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 11 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 11 | 0.32 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 36 | 0.32 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 36 | 0.32 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 36 | 0.32 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 46 | 0.32 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 5 | 0.32 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 24 | 0.32 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 37 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 4 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 4 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 4 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 4 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 4 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 4 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 7 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 7 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 7 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 7 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 7 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 7 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 14 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 14 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 14 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 14 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 14 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 14 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 16 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 16 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 16 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 16 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 16 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 16 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 20 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 20 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 20 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 20 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 20 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 20 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 23 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 23 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 23 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 23 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 23 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 23 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 25 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 25 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 25 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 25 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 25 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 25 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 29 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 29 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 29 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 29 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 29 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 29 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 35 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 35 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 35 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 35 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 35 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 35 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 39 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 39 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 39 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 39 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 39 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 39 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 41 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 41 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 41 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 41 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 41 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 41 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 45 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 45 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 45 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 45 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 45 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 45 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 48 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 48 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 48 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 48 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 48 | 0.32 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 48 | 0.32 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 15 | 0.32 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 15 | 0.32 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 15 | 0.32 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 15 | 0.32 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 15 | 0.32 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 15 | 0.32 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 45 | 0.32 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 45 | 0.32 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 45 | 0.32 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 45 | 0.32 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 45 | 0.32 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 45 | 0.32 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 7 | 0.32 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 7 | 0.32 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 7 | 0.32 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 7 | 0.32 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 7 | 0.32 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 7 | 0.32 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 28 | 0.32 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 28 | 0.32 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 41 | 0.32 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 41 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 6 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 6 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 6 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 6 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 10 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 10 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 10 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 10 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 19 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 19 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 19 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 19 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 24 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 24 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 24 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 24 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 31 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 31 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 31 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 31 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 34 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 34 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 34 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 34 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 39 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 39 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 39 | 0.32 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 39 | 0.32 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 39 | 0.32 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 39 | 0.32 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 28 | 0.31 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 4 | 0.31 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 12 | 0.31 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 2 | 0.31 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 2 | 0.31 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 3 | 0.31 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 3 | 0.31 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 4 | 0.31 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 4 | 0.31 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 8 | 0.31 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 8 | 0.31 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 21 | 0.31 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 21 | 0.31 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 29 | 0.31 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 29 | 0.31 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 43 | 0.31 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 43 | 0.31 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 21 | 0.31 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 46 | 0.31 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 12 | 0.31 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.31 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 37 | 0.31 |
| (2,904) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 18 | 0.31 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 43 | 0.31 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 1 | 0.31 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 1 | 0.31 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 1 | 0.31 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 19 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 2 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 3 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 4 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 6 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 8 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 11 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 13 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 15 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 16 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 17 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 19 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 20 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 23 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 26 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 29 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 30 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 31 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 33 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 34 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 35 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 36 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 41 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 42 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 43 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 44 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 45 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 46 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 47 | 0.31 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 48 | 0.31 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 19 | 0.31 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 50 | 0.31 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.31 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 8 | 0.31 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 17 | 0.31 |
| (2,800) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 44 | 0.31 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 5 | 0.31 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 22 | 0.31 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 31 | 0.31 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 43 | 0.31 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.31 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 40 | 0.31 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 44 | 0.31 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 13 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 2 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 2 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 2 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 10 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 10 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 10 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 11 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 11 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 11 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 13 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 13 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 13 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 16 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 16 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 16 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 18 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 18 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 18 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 28 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 28 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 28 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 34 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 34 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 34 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 37 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 37 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 37 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 46 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 46 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 46 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 48 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 48 | 0.31 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 48 | 0.31 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 28 | 0.31 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 40 | 0.31 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 18 | 0.31 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 18 | 0.31 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 31 | 0.31 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 31 | 0.31 |
| (2,702) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 3 | 0.31 |
| (2,702) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 36 | 0.31 |
| (2,702) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 44 | 0.31 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 10 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 41 | 0.31 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 45 | 0.31 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.31 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.31 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.31 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 7 | 0.31 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 7 | 0.31 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 7 | 0.31 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 12 | 0.31 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 12 | 0.31 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 12 | 0.31 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 23 | 0.31 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 23 | 0.31 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 23 | 0.31 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 49 | 0.31 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 49 | 0.31 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 49 | 0.31 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.31 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 19 | 0.31 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 19 | 0.31 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 19 | 0.31 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 40 | 0.31 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 40 | 0.31 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 40 | 0.31 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 33 | 0.31 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 3 | 0.31 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 10 | 0.31 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 39 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 2 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 3 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 6 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 8 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 13 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 14 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 15 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 22 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 23 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 26 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 28 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 31 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 36 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 39 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 41 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 42 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 43 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 45 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 47 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 49 | 0.31 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 50 | 0.31 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 23 | 0.31 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 23 | 0.31 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 44 | 0.31 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 43 | 0.31 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 39 | 0.31 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 39 | 0.31 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 39 | 0.31 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 8 | 0.31 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 8 | 0.31 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 8 | 0.31 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 9 | 0.31 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 9 | 0.31 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 9 | 0.31 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 38 | 0.31 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 38 | 0.31 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 38 | 0.31 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 28 | 0.31 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 28 | 0.31 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 28 | 0.31 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 40 | 0.31 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 40 | 0.31 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 40 | 0.31 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 5 | 0.31 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 22 | 0.31 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 31 | 0.31 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 43 | 0.31 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 6 | 0.31 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 14 | 0.31 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 31 | 0.31 |
| (2,547) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 50 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 1 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 2 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 3 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 4 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 5 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 6 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 7 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 8 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 9 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 10 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 11 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 12 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 13 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 14 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 15 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 16 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 17 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 18 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 19 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 20 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 21 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 22 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 23 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 24 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 25 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 26 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 27 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 28 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 29 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 30 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 31 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 32 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 33 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 34 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 35 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 36 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 37 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 38 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 39 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 40 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 41 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 42 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 43 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 44 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 45 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 46 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 47 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 48 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 49 | 0.31 |
| (2,545) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 50 | 0.31 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 23 | 0.31 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 22 | 0.31 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 18 | 0.31 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 42 | 0.31 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 5 | 0.31 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 19 | 0.31 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 24 | 0.31 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 26 | 0.31 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 31 | 0.31 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 35 | 0.31 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 36 | 0.31 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 37 | 0.31 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 39 | 0.31 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 49 | 0.31 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 21 | 0.31 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 46 | 0.31 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 22 | 0.31 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 12 | 0.31 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.31 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 37 | 0.31 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.31 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 40 | 0.31 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 44 | 0.31 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 18 | 0.31 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 42 | 0.31 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.31 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.31 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.31 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 5 | 0.31 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 19 | 0.31 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 24 | 0.31 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 26 | 0.31 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 31 | 0.31 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 35 | 0.31 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 36 | 0.31 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 37 | 0.31 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 39 | 0.31 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 49 | 0.31 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 28 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 40 | 0.31 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 8 | 0.31 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 17 | 0.31 |
| (2,390) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 3 | 0.31 |
| (2,390) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 36 | 0.31 |
| (2,390) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 44 | 0.31 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 23 | 0.31 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 23 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 2 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 2 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 2 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 10 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 10 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 10 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 11 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 11 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 11 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 13 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 13 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 13 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 16 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 16 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 16 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 18 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 18 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 18 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 28 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 28 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 28 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 34 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 34 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 34 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 37 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 37 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 37 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 46 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 46 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 46 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 48 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 48 | 0.31 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 48 | 0.31 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 7 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 7 | 0.31 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 7 | 0.31 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 12 | 0.31 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 12 | 0.31 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 12 | 0.31 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 23 | 0.31 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 23 | 0.31 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 23 | 0.31 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 49 | 0.31 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 49 | 0.31 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 49 | 0.31 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 19 | 0.31 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 2 | 0.31 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 2 | 0.31 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 3 | 0.31 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 3 | 0.31 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 4 | 0.31 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 4 | 0.31 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 8 | 0.31 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 8 | 0.31 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 21 | 0.31 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 21 | 0.31 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 29 | 0.31 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 29 | 0.31 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 43 | 0.31 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 43 | 0.31 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 18 | 0.31 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 18 | 0.31 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 31 | 0.31 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 31 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 2 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 3 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 4 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 6 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 8 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 11 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 13 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 15 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 16 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 17 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 19 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 20 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 23 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 26 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 29 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 30 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 31 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 33 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 34 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 35 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 36 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 41 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 42 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 43 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 44 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 45 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 46 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 47 | 0.31 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 48 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 2 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 3 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 6 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 8 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 13 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 14 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 15 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 22 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 23 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 26 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 28 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 31 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 36 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 39 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 41 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 42 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 43 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 45 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 47 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 49 | 0.31 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 50 | 0.31 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.31 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 1 | 0.31 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 1 | 0.31 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 1 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 19 | 0.31 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 50 | 0.31 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 23 | 0.31 |
| (2,221) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 44 | 0.31 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 33 | 0.31 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 13 | 0.31 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 3 | 0.31 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 10 | 0.31 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 39 | 0.31 |
| (2,168) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 18 | 0.31 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 10 | 0.31 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 41 | 0.31 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 45 | 0.31 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 6 | 0.31 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 14 | 0.31 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 31 | 0.31 |
| (2,16) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 50 | 0.31 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 28 | 0.31 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 4 | 0.31 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 12 | 0.31 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 44 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 1 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 2 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 3 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 4 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 5 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 6 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 7 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 8 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 9 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 10 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 11 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 12 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 13 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 14 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 15 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 16 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 17 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 18 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 19 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 20 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 21 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 22 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 23 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 24 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 25 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 26 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 27 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 28 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 29 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 30 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 31 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 32 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 33 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 34 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 35 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 36 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 37 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 38 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 39 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 40 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 41 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 42 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 43 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 44 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 45 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 46 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 47 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 48 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 49 | 0.31 |
| (2,14) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 50 | 0.31 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 44 | 0.31 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 44 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 5 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 5 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 5 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 5 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 5 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 5 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 5 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 5 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 5 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 15 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 15 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 15 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 15 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 15 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 15 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 15 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 15 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 15 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 18 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 18 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 18 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 18 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 18 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 18 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 18 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 18 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 18 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 20 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 20 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 20 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:25:GLN:HA | 20 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 20 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 20 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 20 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 20 | 0.31 |
| (1,989) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HG2 | 20 | 0.31 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 1 | 0.31 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 1 | 0.31 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 6 | 0.31 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 6 | 0.31 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 28 | 0.31 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 4 | 0.31 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 12 | 0.31 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 2 | 0.31 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 2 | 0.31 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 3 | 0.31 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 3 | 0.31 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 4 | 0.31 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 4 | 0.31 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 8 | 0.31 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 8 | 0.31 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 21 | 0.31 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 21 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 29 | 0.31 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 29 | 0.31 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 43 | 0.31 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 43 | 0.31 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 21 | 0.31 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 46 | 0.31 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 12 | 0.31 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.31 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 37 | 0.31 |
| (1,878) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 18 | 0.31 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 43 | 0.31 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 1 | 0.31 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 1 | 0.31 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 1 | 0.31 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 19 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 2 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 3 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 4 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 6 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 8 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 11 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 13 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 15 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 16 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 17 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 19 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 20 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 23 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 26 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 29 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 30 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 31 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 33 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 34 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 35 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 36 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 41 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 42 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 43 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 44 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 45 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 46 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 47 | 0.31 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 48 | 0.31 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 19 | 0.31 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 50 | 0.31 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.31 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 8 | 0.31 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 17 | 0.31 |
| (1,775) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 44 | 0.31 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.31 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 40 | 0.31 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 44 | 0.31 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 13 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 2 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 2 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 2 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 10 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 10 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 10 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 11 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 11 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 11 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 13 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 13 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 13 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 16 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 16 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 16 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 18 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 18 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 18 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 28 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 28 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 28 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 34 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 34 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 34 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 37 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 37 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 37 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 46 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 46 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 46 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 48 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 48 | 0.31 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 48 | 0.31 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 28 | 0.31 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 40 | 0.31 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 18 | 0.31 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 18 | 0.31 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 31 | 0.31 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 31 | 0.31 |
| (1,678) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 3 | 0.31 |
| (1,678) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 36 | 0.31 |
| (1,678) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 44 | 0.31 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 10 | 0.31 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 41 | 0.31 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 45 | 0.31 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.31 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.31 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 7 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 7 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 7 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 12 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 12 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 12 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 23 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 23 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 23 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 49 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 49 | 0.31 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 49 | 0.31 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 33 | 0.31 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 3 | 0.31 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 10 | 0.31 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 39 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 2 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 3 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 6 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 8 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 13 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 14 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 15 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 22 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 23 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 26 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 28 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 31 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 36 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 39 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 41 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 42 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 43 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 45 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 47 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 49 | 0.31 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 50 | 0.31 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 23 | 0.31 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 23 | 0.31 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 44 | 0.31 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 40 | 0.31 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 40 | 0.31 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 40 | 0.31 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 5 | 0.31 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 22 | 0.31 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 31 | 0.31 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 43 | 0.31 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 6 | 0.31 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 14 | 0.31 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 31 | 0.31 |
| (1,537) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:3:PRO:HB3 | 50 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 1 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 2 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 3 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 4 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 5 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 6 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 7 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 8 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 9 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 10 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 11 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 12 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 13 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 14 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 15 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 16 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 17 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 18 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 19 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 20 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 21 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 22 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 23 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 24 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 25 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 26 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 27 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 28 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 29 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 30 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 31 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 32 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 33 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 34 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 35 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 36 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 37 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 38 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 39 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 40 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 41 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 42 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 43 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 44 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 45 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 46 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 47 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 48 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 49 | 0.31 |
| (1,535) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HD3 | 50 | 0.31 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 23 | 0.31 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 22 | 0.31 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 18 | 0.31 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 42 | 0.31 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 5 | 0.31 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 19 | 0.31 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 24 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 26 | 0.31 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 31 | 0.31 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 35 | 0.31 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 36 | 0.31 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 37 | 0.31 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 39 | 0.31 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 49 | 0.31 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 45 | 0.31 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 45 | 0.31 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 45 | 0.31 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 13 | 0.31 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 13 | 0.31 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 13 | 0.31 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 28 | 0.31 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 28 | 0.31 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 28 | 0.31 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 49 | 0.31 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 49 | 0.31 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 49 | 0.31 |
| (1,230) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:25:GLN:HG3 | 19 | 0.31 |
| (1,230) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:25:GLN:HG3 | 35 | 0.31 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 13 | 0.31 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 14 | 0.31 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 16 | 0.31 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 18 | 0.31 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 25 | 0.31 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 28 | 0.31 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 35 | 0.31 |
| (1,203) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:20:PHE:HB2 | 1 | 0.31 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 8 | 0.31 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 8 | 0.31 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 8 | 0.31 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 34 | 0.31 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 34 | 0.31 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 34 | 0.31 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 20 | 0.31 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 20 | 0.31 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 20 | 0.31 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 50 | 0.31 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 50 | 0.31 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 50 | 0.31 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 23 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 38 | 0.31 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 7 | 0.31 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 39 | 0.31 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 13 | 0.31 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 29 | 0.31 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 47 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 11 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 11 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 11 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 11 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 11 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 11 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 17 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 17 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 17 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 17 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 17 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 17 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 19 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 19 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 19 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 19 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 19 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 19 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 34 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 34 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 34 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 34 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 34 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 34 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 35 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 35 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 35 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 35 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 35 | 0.31 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 35 | 0.31 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 31 | 0.31 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 31 | 0.31 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 31 | 0.31 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 31 | 0.31 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 31 | 0.31 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 31 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 44 | 0.31 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 44 | 0.31 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 29 | 0.31 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 29 | 0.31 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 29 | 0.31 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 29 | 0.31 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 29 | 0.31 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 29 | 0.31 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 37 | 0.31 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 37 | 0.31 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 37 | 0.31 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 37 | 0.31 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 37 | 0.31 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 37 | 0.31 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 2 | 0.31 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 2 | 0.31 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 13 | 0.31 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 13 | 0.31 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HG2 | 46 | 0.31 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HG2 | 46 | 0.31 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HG2 | 46 | 0.31 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.31 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.31 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.31 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 23 | 0.31 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 23 | 0.31 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 15 | 0.31 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 15 | 0.31 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 15 | 0.31 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 15 | 0.31 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 18 | 0.31 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 18 | 0.31 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 18 | 0.31 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 18 | 0.31 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 30 | 0.31 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 30 | 0.31 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 30 | 0.31 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 30 | 0.31 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 23 | 0.3 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 7 | 0.3 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 49 | 0.3 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 1 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 6 | 0.3 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 8 | 0.3 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 9 | 0.3 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 10 | 0.3 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 13 | 0.3 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 15 | 0.3 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 23 | 0.3 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 25 | 0.3 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 33 | 0.3 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 34 | 0.3 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 41 | 0.3 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 47 | 0.3 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 48 | 0.3 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 49 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 7 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 7 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 9 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 9 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 14 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 14 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 15 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 15 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 16 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 16 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 19 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 19 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 20 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 20 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 24 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 24 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 26 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 26 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 31 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 31 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 33 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 33 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 35 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 35 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 36 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 36 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 37 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 37 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 39 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 39 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 41 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 41 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 42 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 42 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 45 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 45 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 48 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 48 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 50 | 0.3 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 50 | 0.3 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 1 | 0.3 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 17 | 0.3 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 18 | 0.3 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 37 | 0.3 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 2 | 0.3 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 10 | 0.3 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 13 | 0.3 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 15 | 0.3 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 21 | 0.3 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 23 | 0.3 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 25 | 0.3 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 42 | 0.3 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 46 | 0.3 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 48 | 0.3 |
| (2,850) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 14 | 0.3 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 1 | 0.3 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 5 | 0.3 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 7 | 0.3 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 24 | 0.3 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 27 | 0.3 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 28 | 0.3 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 37 | 0.3 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 40 | 0.3 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 42 | 0.3 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.3 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.3 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 1 | 0.3 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 13 | 0.3 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 16 | 0.3 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 22 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 23 | 0.3 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 25 | 0.3 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 26 | 0.3 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 36 | 0.3 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 42 | 0.3 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 43 | 0.3 |
| (2,800) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 31 | 0.3 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 27 | 0.3 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 41 | 0.3 |
| (2,768) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 5 | 0.3 |
| (2,768) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 28 | 0.3 |
| (2,753) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 26 | 0.3 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 28 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 1 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 3 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 4 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 5 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 7 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 10 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 13 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 14 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 18 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 22 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 24 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 26 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 27 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 31 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 33 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 37 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 38 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 39 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 41 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 44 | 0.3 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 47 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 5 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 5 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 5 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 7 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 7 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 7 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 17 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 17 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 17 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 19 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 19 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 19 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 22 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 22 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 22 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 29 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 29 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 29 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 42 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 42 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 42 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 45 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 45 | 0.3 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 45 | 0.3 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 26 | 0.3 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 35 | 0.3 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 47 | 0.3 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 1 | 0.3 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 1 | 0.3 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 1 | 0.3 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 16 | 0.3 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 16 | 0.3 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 16 | 0.3 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 22 | 0.3 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 22 | 0.3 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 22 | 0.3 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.3 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.3 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 1 | 0.3 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 1 | 0.3 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 1 | 0.3 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.3 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.3 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.3 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 19 | 0.3 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 25 | 0.3 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 27 | 0.3 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 39 | 0.3 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 50 | 0.3 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 13 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 7 | 0.3 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 31 | 0.3 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 42 | 0.3 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 43 | 0.3 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 39 | 0.3 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 1 | 0.3 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 17 | 0.3 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 18 | 0.3 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 6 | 0.3 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 6 | 0.3 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 6 | 0.3 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 12 | 0.3 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 12 | 0.3 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 12 | 0.3 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 13 | 0.3 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 13 | 0.3 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 13 | 0.3 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 31 | 0.3 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 31 | 0.3 |
| (2,569) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 31 | 0.3 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.3 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.3 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.3 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 27 | 0.3 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 41 | 0.3 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 12 | 0.3 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 12 | 0.3 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 2 | 0.3 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 5 | 0.3 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 33 | 0.3 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 49 | 0.3 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 37 | 0.3 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 47 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 1 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 2 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 3 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 6 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 7 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 8 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 9 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 10 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 11 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 13 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 14 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 16 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 17 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 18 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 20 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 21 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 22 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 23 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 27 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 28 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 29 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 30 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 32 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 33 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 34 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 38 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 40 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 41 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 42 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 43 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 45 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 46 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 48 | 0.3 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 50 | 0.3 |
| (2,5) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 14 | 0.3 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 12 | 0.3 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 12 | 0.3 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 2 | 0.3 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 5 | 0.3 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 33 | 0.3 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 49 | 0.3 |
| (2,446) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 26 | 0.3 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 37 | 0.3 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 47 | 0.3 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 39 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 1 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 2 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 3 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 6 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 7 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 8 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 9 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 10 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 11 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 13 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 14 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 16 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 17 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 18 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 20 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 21 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 22 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 23 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 27 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 28 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 29 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 30 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 32 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 33 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 34 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 38 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 40 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 41 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 42 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 43 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 45 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 46 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 48 | 0.3 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 50 | 0.3 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 1 | 0.3 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 13 | 0.3 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 16 | 0.3 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 22 | 0.3 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 23 | 0.3 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 25 | 0.3 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 26 | 0.3 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 36 | 0.3 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 42 | 0.3 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 43 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 5 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 5 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 5 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 7 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 7 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 7 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 17 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 17 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 17 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 19 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 19 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 19 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 22 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 22 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 22 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 29 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 29 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 29 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 42 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 42 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 42 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 45 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 45 | 0.3 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 45 | 0.3 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 1 | 0.3 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 1 | 0.3 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 1 | 0.3 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 16 | 0.3 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 16 | 0.3 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 16 | 0.3 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 22 | 0.3 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 22 | 0.3 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 22 | 0.3 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 37 | 0.3 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 2 | 0.3 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 10 | 0.3 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 13 | 0.3 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 15 | 0.3 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 21 | 0.3 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 23 | 0.3 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 25 | 0.3 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 42 | 0.3 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 46 | 0.3 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 48 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 1 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 3 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 4 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 5 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 7 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 10 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 13 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 14 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 18 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 22 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 24 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 26 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 27 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 31 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 33 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 37 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 38 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 39 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 41 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 44 | 0.3 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 47 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 7 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 7 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 9 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 9 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 14 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 14 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 15 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 15 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 16 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 16 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 19 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 19 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 20 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 20 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 24 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 24 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 26 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 26 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 31 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 31 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 33 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 33 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 35 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 35 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 36 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 36 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 37 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 37 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 39 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 39 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 41 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 41 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 42 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 42 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 45 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 45 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 48 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 48 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 50 | 0.3 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 50 | 0.3 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 1 | 0.3 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 5 | 0.3 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 7 | 0.3 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 24 | 0.3 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 27 | 0.3 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 28 | 0.3 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 37 | 0.3 |
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 40 | 0.3 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.3 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.3 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 42 | 0.3 |
| (2,221) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 31 | 0.3 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 19 | 0.3 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 25 | 0.3 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 27 | 0.3 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 39 | 0.3 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 50 | 0.3 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 28 | 0.3 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 13 | 0.3 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 7 | 0.3 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 31 | 0.3 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 42 | 0.3 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 43 | 0.3 |
| (2,164) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 5 | 0.3 |
| (2,164) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 28 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 26 | 0.3 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 35 | 0.3 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 47 | 0.3 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 23 | 0.3 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 7 | 0.3 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 49 | 0.3 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 1 | 0.3 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 6 | 0.3 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 8 | 0.3 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 9 | 0.3 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 10 | 0.3 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 13 | 0.3 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 15 | 0.3 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 23 | 0.3 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 25 | 0.3 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 33 | 0.3 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 34 | 0.3 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 41 | 0.3 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 47 | 0.3 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 48 | 0.3 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 49 | 0.3 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 24 | 0.3 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 24 | 0.3 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 48 | 0.3 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 48 | 0.3 |
| (1,95) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB3 | 16 | 0.3 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 23 | 0.3 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 7 | 0.3 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 49 | 0.3 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 1 | 0.3 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 6 | 0.3 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 8 | 0.3 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 9 | 0.3 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 10 | 0.3 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 13 | 0.3 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 15 | 0.3 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 23 | 0.3 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 25 | 0.3 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 33 | 0.3 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 34 | 0.3 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 41 | 0.3 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 47 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 48 | 0.3 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 49 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 7 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 7 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 9 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 9 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 14 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 14 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 15 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 15 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 16 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 16 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 19 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 19 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 20 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 20 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 24 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 24 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 26 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 26 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 31 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 31 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 33 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 33 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 35 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 35 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 36 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 36 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 37 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 37 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 39 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 39 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 41 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 41 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 42 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 42 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 45 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 45 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 48 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 48 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 50 | 0.3 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 50 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 1 | 0.3 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 17 | 0.3 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 18 | 0.3 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 37 | 0.3 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 2 | 0.3 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 10 | 0.3 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 13 | 0.3 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 15 | 0.3 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 21 | 0.3 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 23 | 0.3 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 25 | 0.3 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 42 | 0.3 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 46 | 0.3 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 48 | 0.3 |
| (1,824) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 14 | 0.3 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 1 | 0.3 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 5 | 0.3 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 7 | 0.3 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 24 | 0.3 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 27 | 0.3 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 28 | 0.3 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 37 | 0.3 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 40 | 0.3 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 42 | 0.3 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.3 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.3 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 1 | 0.3 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 13 | 0.3 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 16 | 0.3 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 22 | 0.3 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 23 | 0.3 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 25 | 0.3 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 26 | 0.3 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 36 | 0.3 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 42 | 0.3 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 43 | 0.3 |
| (1,775) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 31 | 0.3 |
| (1,743) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 5 | 0.3 |
| (1,743) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 28 | 0.3 |
| (1,728) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 26 | 0.3 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 28 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 1 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 3 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 4 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 5 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 7 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 10 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 13 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 14 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 18 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 22 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 24 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 26 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 27 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 31 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 33 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 37 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 38 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 39 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 41 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 44 | 0.3 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 47 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 5 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 5 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 5 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 7 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 7 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 7 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 17 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 17 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 17 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 19 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 19 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 19 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 22 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 22 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 22 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 29 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 29 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 29 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 42 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 42 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 42 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 45 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 45 | 0.3 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 45 | 0.3 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 26 | 0.3 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 35 | 0.3 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 47 | 0.3 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 1 | 0.3 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 1 | 0.3 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 1 | 0.3 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 16 | 0.3 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 16 | 0.3 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 16 | 0.3 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 22 | 0.3 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 22 | 0.3 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 22 | 0.3 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 19 | 0.3 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 25 | 0.3 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 27 | 0.3 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 39 | 0.3 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 50 | 0.3 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 13 | 0.3 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 7 | 0.3 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 31 | 0.3 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 42 | 0.3 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 43 | 0.3 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 39 | 0.3 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.3 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.3 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.3 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 27 | 0.3 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 41 | 0.3 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 12 | 0.3 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 12 | 0.3 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 2 | 0.3 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 5 | 0.3 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 33 | 0.3 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 49 | 0.3 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 37 | 0.3 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 47 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 1 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 2 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 3 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 6 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 7 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 8 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 9 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 10 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 11 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 13 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 14 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 16 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 17 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 18 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 20 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 21 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 22 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 23 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 27 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 28 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 29 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 30 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 32 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 33 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 34 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 38 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 40 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 41 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 42 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 43 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 45 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 46 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 48 | 0.3 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 50 | 0.3 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 2 | 0.3 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 19 | 0.3 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 30 | 0.3 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 49 | 0.3 |
| (1,262) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 42 | 0.3 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 48 | 0.3 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 32 | 0.3 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 32 | 0.3 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 32 | 0.3 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 36 | 0.3 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 36 | 0.3 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 36 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 1 | 0.3 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 21 | 0.3 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 23 | 0.3 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 45 | 0.3 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 46 | 0.3 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 48 | 0.3 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 45 | 0.3 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 45 | 0.3 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 45 | 0.3 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 8 | 0.3 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 8 | 0.3 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 8 | 0.3 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 4 | 0.3 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 12 | 0.3 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 15 | 0.3 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 16 | 0.3 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 18 | 0.3 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 20 | 0.3 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 40 | 0.3 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 41 | 0.3 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 5 | 0.3 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 5 | 0.3 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 5 | 0.3 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 4 | 0.3 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 15 | 0.3 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 12 | 0.3 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 18 | 0.3 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 22 | 0.3 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 48 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 3 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 3 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 3 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 3 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 3 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 3 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 12 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 12 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 12 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 12 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 12 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 12 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 36 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 36 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 36 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 36 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 36 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 36 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 46 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 46 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 46 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 46 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 46 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 46 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 49 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 49 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 49 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 49 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 49 | 0.3 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 49 | 0.3 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 2 | 0.3 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 2 | 0.3 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 2 | 0.3 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 2 | 0.3 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 2 | 0.3 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 2 | 0.3 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 25 | 0.3 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 25 | 0.3 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 25 | 0.3 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 25 | 0.3 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 25 | 0.3 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 25 | 0.3 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 36 | 0.3 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 36 | 0.3 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HG2 | 42 | 0.3 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HG2 | 42 | 0.3 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HG2 | 42 | 0.3 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.3 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.3 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 42 | 0.3 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 18 | 0.3 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 18 | 0.3 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 40 | 0.3 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 40 | 0.3 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 49 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 49 | 0.3 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 1 | 0.3 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 1 | 0.3 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 1 | 0.3 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 1 | 0.3 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 27 | 0.3 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 27 | 0.3 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 27 | 0.3 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 27 | 0.3 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 44 | 0.3 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 44 | 0.3 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 44 | 0.3 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 44 | 0.3 |
| (2,99) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 15 | 0.29 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 25 | 0.29 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 24 | 0.29 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 50 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 2 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 3 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 4 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 5 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 7 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 11 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 12 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 14 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 16 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 17 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 18 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 19 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 20 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 21 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 22 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 24 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 26 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 27 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 28 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 29 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 30 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 31 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 32 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 35 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 36 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 37 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 38 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 39 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 40 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 42 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 43 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 44 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 45 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 46 | 0.29 |
| (2,921) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 50 | 0.29 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 27 | 0.29 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.29 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 23 | 0.29 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 45 | 0.29 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 47 | 0.29 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.29 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 31 | 0.29 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 41 | 0.29 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 17 | 0.29 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 22 | 0.29 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 34 | 0.29 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 36 | 0.29 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 41 | 0.29 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 1 | 0.29 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 34 | 0.29 |
| (2,848) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 25 | 0.29 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 34 | 0.29 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 7 | 0.29 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 11 | 0.29 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 15 | 0.29 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 33 | 0.29 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 47 | 0.29 |
| (2,800) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 7 | 0.29 |
| (2,800) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 19 | 0.29 |
| (2,800) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 36 | 0.29 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 11 | 0.29 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 17 | 0.29 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 19 | 0.29 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 26 | 0.29 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 48 | 0.29 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 35 | 0.29 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 42 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 44 | 0.29 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 2 | 0.29 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 48 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 2 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 6 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 8 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 9 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 11 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 12 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 15 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 16 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 17 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 19 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 20 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 21 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 23 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 25 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 28 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 29 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 30 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 32 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 34 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 35 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 36 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 40 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 42 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 43 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 45 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 46 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 48 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 49 | 0.29 |
| (2,731) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 50 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 1 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 2 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 3 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 4 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 5 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 6 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 7 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 8 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 9 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 10 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 11 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 12 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 13 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 14 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 15 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 16 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 17 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 18 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 19 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 20 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 21 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 22 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 23 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 24 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 25 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 26 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 27 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 28 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 29 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 30 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 31 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 32 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 33 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 34 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 35 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 36 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 37 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 38 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 39 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 40 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 41 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 42 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 43 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 44 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 45 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 46 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 47 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 48 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 49 | 0.29 |
| (2,729) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 50 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 3 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 3 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 3 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 6 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 6 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 6 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 9 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 9 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 9 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 15 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 15 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 15 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 21 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 21 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 21 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 33 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 33 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 33 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 50 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 50 | 0.29 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 50 | 0.29 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 49 | 0.29 |
| (2,702) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 19 | 0.29 |
| (2,702) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 20 | 0.29 |
| (2,702) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 49 | 0.29 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 5 | 0.29 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 28 | 0.29 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 36 | 0.29 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 42 | 0.29 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 43 | 0.29 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.29 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.29 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 2 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 2 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 2 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 5 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 5 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 5 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 13 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 13 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 13 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 25 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 25 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 25 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 38 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 38 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 38 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 41 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 41 | 0.29 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 41 | 0.29 |
| (2,682) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 39 | 0.29 |
| (2,682) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 47 | 0.29 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 14 | 0.29 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.29 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 2 | 0.29 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 2 | 0.29 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 2 | 0.29 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 42 | 0.29 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 42 | 0.29 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 42 | 0.29 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 2 | 0.29 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 5 | 0.29 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 14 | 0.29 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 22 | 0.29 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 42 | 0.29 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 44 | 0.29 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 45 | 0.29 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 22 | 0.29 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 1 | 0.29 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 6 | 0.29 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 30 | 0.29 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 32 | 0.29 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 38 | 0.29 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 2 | 0.29 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 2 | 0.29 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 3 | 0.29 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 3 | 0.29 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 5 | 0.29 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 5 | 0.29 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 31 | 0.29 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 35 | 0.29 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 35 | 0.29 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 35 | 0.29 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 23 | 0.29 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 31 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,632) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 15 | 0.29 |
| (2,625) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 4 | 0.29 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 31 | 0.29 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 41 | 0.29 |
| (2,582) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 13 | 0.29 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 3 | 0.29 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 3 | 0.29 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 3 | 0.29 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 10 | 0.29 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 10 | 0.29 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 10 | 0.29 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 25 | 0.29 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 25 | 0.29 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 25 | 0.29 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 41 | 0.29 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 41 | 0.29 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 41 | 0.29 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 42 | 0.29 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 42 | 0.29 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 42 | 0.29 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 42 | 0.29 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 42 | 0.29 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 42 | 0.29 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 35 | 0.29 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 35 | 0.29 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 35 | 0.29 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 22 | 0.29 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 11 | 0.29 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 17 | 0.29 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 19 | 0.29 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 26 | 0.29 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 48 | 0.29 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 28 | 0.29 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 28 | 0.29 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 11 | 0.29 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 50 | 0.29 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 4 | 0.29 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 12 | 0.29 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 15 | 0.29 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 25 | 0.29 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 44 | 0.29 |
| (2,516) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 47 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 22 | 0.29 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 27 | 0.29 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 28 | 0.29 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 28 | 0.29 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 11 | 0.29 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 50 | 0.29 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.29 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 23 | 0.29 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 45 | 0.29 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 47 | 0.29 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.29 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 31 | 0.29 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.29 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.29 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.29 |
| (2,426) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 4 | 0.29 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 4 | 0.29 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 12 | 0.29 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 15 | 0.29 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 25 | 0.29 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 44 | 0.29 |
| (2,400) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 47 | 0.29 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 49 | 0.29 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 7 | 0.29 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 11 | 0.29 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 15 | 0.29 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 33 | 0.29 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 47 | 0.29 |
| (2,390) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 19 | 0.29 |
| (2,390) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 20 | 0.29 |
| (2,390) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 49 | 0.29 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 2 | 0.29 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 2 | 0.29 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 3 | 0.29 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 3 | 0.29 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 5 | 0.29 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 5 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 3 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 3 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 3 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 6 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 6 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 6 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 9 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 9 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 9 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 15 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 15 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 15 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 21 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 21 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 21 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 33 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 33 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 33 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 50 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 50 | 0.29 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 50 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 1 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 2 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 3 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 4 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 5 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 6 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 7 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 8 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 9 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 10 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 11 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 12 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 13 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 14 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 15 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 16 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 17 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 18 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 19 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 20 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 21 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 22 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 23 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 24 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 25 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 26 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 27 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 28 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 29 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 30 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 31 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 32 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 33 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 34 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 35 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 36 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 37 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 38 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 39 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 40 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 41 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 42 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 43 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 44 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 45 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 46 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 47 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 48 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 49 | 0.29 |
| (2,338) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 50 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 2 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 2 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 2 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 5 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 5 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 5 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 13 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 13 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 13 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 25 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 25 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 25 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 38 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 38 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 38 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 41 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 41 | 0.29 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 41 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 1 | 0.29 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 34 | 0.29 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 17 | 0.29 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 22 | 0.29 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 34 | 0.29 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 36 | 0.29 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 41 | 0.29 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 35 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 2 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 6 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 8 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 9 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 11 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 12 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 15 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 16 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 17 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 19 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 20 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 21 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 23 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 25 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 28 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 29 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 30 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 32 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 34 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 35 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 36 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 40 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 42 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 43 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 45 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 46 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 48 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 49 | 0.29 |
| (2,319) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 50 | 0.29 |
| (2,317) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 39 | 0.29 |
| (2,317) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 47 | 0.29 |
| (2,315) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 13 | 0.29 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 23 | 0.29 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 31 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,260) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 25 | 0.29 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 30 | 0.29 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 32 | 0.29 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 38 | 0.29 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 34 | 0.29 |
| (2,221) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 7 | 0.29 |
| (2,221) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 19 | 0.29 |
| (2,221) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 36 | 0.29 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 2 | 0.29 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 5 | 0.29 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 14 | 0.29 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 22 | 0.29 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 42 | 0.29 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 44 | 0.29 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 45 | 0.29 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 2 | 0.29 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 48 | 0.29 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 14 | 0.29 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 22 | 0.29 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 1 | 0.29 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 6 | 0.29 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 5 | 0.29 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 28 | 0.29 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 36 | 0.29 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 42 | 0.29 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 43 | 0.29 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 25 | 0.29 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 24 | 0.29 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 50 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 2 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 3 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 4 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 5 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 7 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 11 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 12 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 14 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 16 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 17 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 18 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 19 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 20 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 21 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 22 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 24 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 26 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 27 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 28 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 29 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 30 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 31 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 32 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 35 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 36 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 37 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 38 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 39 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 40 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 42 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 43 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 44 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 45 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 46 | 0.29 |
| (2,155) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 50 | 0.29 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 42 | 0.29 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 44 | 0.29 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:H | 2 | 0.29 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:H | 2 | 0.29 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 20 | 0.29 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 20 | 0.29 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 12 | 0.29 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 12 | 0.29 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 30 | 0.29 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 30 | 0.29 |
| (1,95) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB3 | 3 | 0.29 |
| (1,95) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB3 | 17 | 0.29 |
| (1,95) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB3 | 22 | 0.29 |
| (1,95) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB3 | 24 | 0.29 |
| (1,95) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB3 | 30 | 0.29 |
| (1,95) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB3 | 36 | 0.29 |
| (1,95) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB3 | 41 | 0.29 |
| (1,95) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB3 | 44 | 0.29 |
| (1,95) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:28:SER:HB3 | 49 | 0.29 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 25 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 24 | 0.29 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 50 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 2 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 3 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 4 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 5 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 7 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 11 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 12 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 14 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 16 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 17 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 18 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 19 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 20 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 21 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 22 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 24 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 26 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 27 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 28 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 29 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 30 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 31 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 32 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 35 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 36 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 37 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 38 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 39 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 40 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 42 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 43 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 44 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 45 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 46 | 0.29 |
| (1,895) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 50 | 0.29 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 27 | 0.29 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.29 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 23 | 0.29 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 45 | 0.29 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 47 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 49 | 0.29 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 31 | 0.29 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 41 | 0.29 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 17 | 0.29 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 22 | 0.29 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 34 | 0.29 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 36 | 0.29 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 41 | 0.29 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 1 | 0.29 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 34 | 0.29 |
| (1,822) | 1:A:19:PRO:HA | 1:A:19:PRO:HB3 | 25 | 0.29 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 34 | 0.29 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 7 | 0.29 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 11 | 0.29 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 15 | 0.29 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 33 | 0.29 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 47 | 0.29 |
| (1,775) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 7 | 0.29 |
| (1,775) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 19 | 0.29 |
| (1,775) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 36 | 0.29 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 35 | 0.29 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 42 | 0.29 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 44 | 0.29 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 2 | 0.29 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 48 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 2 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 6 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 8 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 9 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 11 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 12 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 15 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 16 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 17 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 19 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 20 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 21 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 23 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 25 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 28 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 29 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 30 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 32 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 34 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 35 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 36 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 40 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 42 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 43 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 45 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 46 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 48 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 49 | 0.29 |
| (1,707) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 50 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 1 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 2 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 3 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 4 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 5 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 6 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 7 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 8 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 9 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 10 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 11 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 12 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 13 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 14 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 15 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 16 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 17 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 18 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 19 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 20 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 21 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 22 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 23 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 24 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 25 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 26 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 27 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 28 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 29 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 30 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 31 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 32 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 33 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 34 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 35 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 36 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 37 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 38 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 39 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 40 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 41 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 42 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 43 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 44 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 45 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 46 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 47 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 48 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 49 | 0.29 |
| (1,705) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:HB3 | 50 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 3 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 3 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 3 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 6 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 6 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 6 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 9 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 9 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 9 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 15 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 15 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 15 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 21 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 21 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 21 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 33 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 33 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 33 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 50 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 50 | 0.29 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 50 | 0.29 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 49 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,678) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 19 | 0.29 |
| (1,678) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 20 | 0.29 |
| (1,678) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 49 | 0.29 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 5 | 0.29 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 28 | 0.29 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 36 | 0.29 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 42 | 0.29 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 43 | 0.29 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.29 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.29 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 2 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 2 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 2 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 5 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 5 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 5 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 13 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 13 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 13 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 25 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 25 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 25 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 38 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 38 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 38 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 41 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 41 | 0.29 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 41 | 0.29 |
| (1,659) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 39 | 0.29 |
| (1,659) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 47 | 0.29 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 14 | 0.29 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 2 | 0.29 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 5 | 0.29 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 14 | 0.29 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 22 | 0.29 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 42 | 0.29 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 44 | 0.29 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 45 | 0.29 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 22 | 0.29 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 1 | 0.29 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 6 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 30 | 0.29 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 32 | 0.29 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 38 | 0.29 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 2 | 0.29 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 2 | 0.29 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 3 | 0.29 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 3 | 0.29 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 5 | 0.29 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 5 | 0.29 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 31 | 0.29 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 23 | 0.29 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 31 | 0.29 |
| (1,613) | 1:A:8:TYR:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 15 | 0.29 |
| (1,608) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:H | 4 | 0.29 |
| (1,566) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 13 | 0.29 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 42 | 0.29 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 42 | 0.29 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 42 | 0.29 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 35 | 0.29 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 35 | 0.29 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 35 | 0.29 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 22 | 0.29 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 11 | 0.29 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 17 | 0.29 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 19 | 0.29 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 26 | 0.29 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 48 | 0.29 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 28 | 0.29 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 28 | 0.29 |
| (1,52) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 47 | 0.29 |
| (1,52) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 47 | 0.29 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 11 | 0.29 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 50 | 0.29 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 4 | 0.29 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 12 | 0.29 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 15 | 0.29 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 25 | 0.29 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 44 | 0.29 |
| (1,506) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 47 | 0.29 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 4 | 0.29 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 36 | 0.29 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 49 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 44 | 0.29 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 44 | 0.29 |
| (1,378) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 17 | 0.29 |
| (1,378) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 19 | 0.29 |
| (1,378) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 34 | 0.29 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 9 | 0.29 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 1 | 0.29 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 12 | 0.29 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 18 | 0.29 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 18 | 0.29 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 18 | 0.29 |
| (1,230) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:25:GLN:HG3 | 1 | 0.29 |
| (1,230) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:25:GLN:HG3 | 17 | 0.29 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 2 | 0.29 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 5 | 0.29 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 8 | 0.29 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 10 | 0.29 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 15 | 0.29 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 17 | 0.29 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 20 | 0.29 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 29 | 0.29 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 18 | 0.29 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 18 | 0.29 |
| (1,192) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 18 | 0.29 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.29 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.29 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.29 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 15 | 0.29 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 15 | 0.29 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 15 | 0.29 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 31 | 0.29 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 31 | 0.29 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 31 | 0.29 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 1 | 0.29 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 6 | 0.29 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 6 | 0.29 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 6 | 0.29 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 2 | 0.29 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 9 | 0.29 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 10 | 0.29 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 13 | 0.29 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 19 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 30 | 0.29 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 32 | 0.29 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 33 | 0.29 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 39 | 0.29 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 42 | 0.29 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 43 | 0.29 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 48 | 0.29 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 23 | 0.29 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 31 | 0.29 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 31 | 0.29 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 31 | 0.29 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 34 | 0.29 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 36 | 0.29 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 45 | 0.29 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 37 | 0.29 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 34 | 0.29 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 34 | 0.29 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 34 | 0.29 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 34 | 0.29 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 34 | 0.29 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 34 | 0.29 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 44 | 0.29 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 44 | 0.29 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 44 | 0.29 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 44 | 0.29 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 44 | 0.29 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 44 | 0.29 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 3 | 0.29 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 3 | 0.29 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 30 | 0.29 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 30 | 0.29 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 33 | 0.29 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 33 | 0.29 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 43 | 0.29 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 43 | 0.29 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 44 | 0.29 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 44 | 0.29 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 45 | 0.29 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 45 | 0.29 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 3 | 0.29 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 3 | 0.29 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 10 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 10 | 0.29 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 39 | 0.29 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 39 | 0.29 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG2 | 16 | 0.29 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:7:LYS:HG2 | 16 | 0.29 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 16 | 0.29 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 16 | 0.29 |
| (1,1021) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HB2 | 16 | 0.29 |
| (1,1021) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HG3 | 16 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 2 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 2 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 9 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 9 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 13 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 13 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 16 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 16 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 30 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 30 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 33 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 33 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 39 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 39 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 42 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 42 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 43 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 43 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 48 | 0.29 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 48 | 0.29 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:HA | 12 | 0.29 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:HA | 12 | 0.29 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 14 | 0.28 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.28 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 46 | 0.28 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 22 | 0.28 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 23 | 0.28 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 45 | 0.28 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 48 | 0.28 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 50 | 0.28 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 5 | 0.28 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 5 | 0.28 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 5 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 12 | 0.28 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 12 | 0.28 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 12 | 0.28 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 38 | 0.28 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 4 | 0.28 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 16 | 0.28 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 27 | 0.28 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 29 | 0.28 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 37 | 0.28 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 43 | 0.28 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 49 | 0.28 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 4 | 0.28 |
| (2,850) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 6 | 0.28 |
| (2,850) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 47 | 0.28 |
| (2,845) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:16:ASN:H | 32 | 0.28 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 28 | 0.28 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 45 | 0.28 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.28 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 2 | 0.28 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 6 | 0.28 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 10 | 0.28 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 14 | 0.28 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 18 | 0.28 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 24 | 0.28 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 40 | 0.28 |
| (2,800) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 22 | 0.28 |
| (2,800) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 26 | 0.28 |
| (2,800) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 33 | 0.28 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 1 | 0.28 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 7 | 0.28 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 28 | 0.28 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 1 | 0.28 |
| (2,794) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 44 | 0.28 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 3 | 0.28 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 5 | 0.28 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 30 | 0.28 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 31 | 0.28 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 45 | 0.28 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 47 | 0.28 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 26 | 0.28 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 26 | 0.28 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 26 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 27 | 0.28 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 27 | 0.28 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 27 | 0.28 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 30 | 0.28 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 30 | 0.28 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 30 | 0.28 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 4 | 0.28 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 4 | 0.28 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 5 | 0.28 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 5 | 0.28 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 1 | 0.28 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 8 | 0.28 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 17 | 0.28 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 11 | 0.28 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 11 | 0.28 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 11 | 0.28 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 20 | 0.28 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 20 | 0.28 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 20 | 0.28 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 36 | 0.28 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 36 | 0.28 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 36 | 0.28 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 37 | 0.28 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 37 | 0.28 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 37 | 0.28 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 39 | 0.28 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 39 | 0.28 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 39 | 0.28 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 47 | 0.28 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 47 | 0.28 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 47 | 0.28 |
| (2,682) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 26 | 0.28 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 5 | 0.28 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 16 | 0.28 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.28 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.28 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.28 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.28 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.28 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 28 | 0.28 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 28 | 0.28 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 28 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 31 | 0.28 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 31 | 0.28 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 31 | 0.28 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 43 | 0.28 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 43 | 0.28 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 43 | 0.28 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 3 | 0.28 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 3 | 0.28 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 3 | 0.28 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 9 | 0.28 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 47 | 0.28 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 49 | 0.28 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 33 | 0.28 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 11 | 0.28 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 20 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 1 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 2 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 3 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 4 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 5 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 6 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 7 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 8 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 9 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 10 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 11 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 12 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 13 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 14 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 15 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 16 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 17 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 18 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 19 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 20 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 21 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 22 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 23 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 24 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 25 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 26 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 27 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 28 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 29 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 30 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 31 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 32 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 33 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 34 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 35 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 36 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 37 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 38 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 39 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 40 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 41 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 42 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 43 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 44 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 45 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 46 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 47 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 48 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 49 | 0.28 |
| (2,657) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 50 | 0.28 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 6 | 0.28 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 6 | 0.28 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 1 | 0.28 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 3 | 0.28 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 8 | 0.28 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 4 | 0.28 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 4 | 0.28 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 39 | 0.28 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 39 | 0.28 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 22 | 0.28 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 23 | 0.28 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 45 | 0.28 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 48 | 0.28 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 50 | 0.28 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 43 | 0.28 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 43 | 0.28 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 43 | 0.28 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 3 | 0.28 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 3 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 3 | 0.28 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 1 | 0.28 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 7 | 0.28 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 28 | 0.28 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 32 | 0.28 |
| (2,537) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 48 | 0.28 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 6 | 0.28 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 15 | 0.28 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 23 | 0.28 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 31 | 0.28 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 48 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 3 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 3 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 12 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 12 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 25 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 25 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 26 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 26 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 29 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 29 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 35 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 35 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 41 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 41 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 43 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 43 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 47 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 47 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 48 | 0.28 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 48 | 0.28 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 13 | 0.28 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 13 | 0.28 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 30 | 0.28 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 30 | 0.28 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 37 | 0.28 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 37 | 0.28 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 30 | 0.28 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 5 | 0.28 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 24 | 0.28 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 28 | 0.28 |
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 2 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (2,507) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 24 | 0.28 |
| (2,5) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 6 | 0.28 |
| (2,5) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 47 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 1 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 2 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 3 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 4 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 5 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 6 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 7 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 8 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 9 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 10 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 11 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 12 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 13 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 14 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 15 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 16 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 17 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 18 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 19 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 20 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 21 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 22 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 23 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 24 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 25 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 26 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 27 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 28 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 29 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 30 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 31 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 32 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 33 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 34 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 35 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 36 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 37 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 38 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 39 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 40 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 41 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 42 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 43 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 44 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 45 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 46 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 47 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 48 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 49 | 0.28 |
| (2,480) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 50 | 0.28 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 46 | 0.28 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 4 | 0.28 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 4 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 3 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 3 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 12 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 12 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 25 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 25 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 26 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 26 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 29 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 29 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 35 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 35 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 41 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 41 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 43 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 43 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 47 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 47 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 48 | 0.28 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 48 | 0.28 |
| (2,461) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 44 | 0.28 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 13 | 0.28 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 13 | 0.28 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 30 | 0.28 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 30 | 0.28 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 37 | 0.28 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 37 | 0.28 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 30 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 14 | 0.28 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.28 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 5 | 0.28 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 24 | 0.28 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 28 | 0.28 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 2 | 0.28 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 6 | 0.28 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 10 | 0.28 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 14 | 0.28 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 18 | 0.28 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 24 | 0.28 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 40 | 0.28 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 28 | 0.28 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 6 | 0.28 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 6 | 0.28 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 26 | 0.28 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 26 | 0.28 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 26 | 0.28 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 27 | 0.28 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 27 | 0.28 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 27 | 0.28 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 30 | 0.28 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 30 | 0.28 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 30 | 0.28 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 2 | 0.28 |
| (2,354) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 24 | 0.28 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 11 | 0.28 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 11 | 0.28 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 11 | 0.28 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 20 | 0.28 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 20 | 0.28 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 20 | 0.28 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 36 | 0.28 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 36 | 0.28 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 36 | 0.28 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 37 | 0.28 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 37 | 0.28 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 37 | 0.28 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 39 | 0.28 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 39 | 0.28 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 39 | 0.28 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 47 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 47 | 0.28 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 47 | 0.28 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 4 | 0.28 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 4 | 0.28 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 16 | 0.28 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 27 | 0.28 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 29 | 0.28 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 37 | 0.28 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 43 | 0.28 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 49 | 0.28 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 1 | 0.28 |
| (2,317) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 26 | 0.28 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 38 | 0.28 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 1 | 0.28 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 5 | 0.28 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 5 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 1 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 2 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 3 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 4 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 5 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 6 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 7 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 8 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 9 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 10 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 11 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 12 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 13 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 14 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 15 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 16 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 17 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 18 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 19 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 20 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 21 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 22 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 23 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 24 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 25 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 26 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 27 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 28 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 29 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 30 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 31 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 32 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 33 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 34 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 35 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 36 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 37 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 38 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 39 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 40 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 41 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 42 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 43 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 44 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 45 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 46 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 47 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 48 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 49 | 0.28 |
| (2,258) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 50 | 0.28 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.28 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 5 | 0.28 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 5 | 0.28 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 5 | 0.28 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 12 | 0.28 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 12 | 0.28 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 12 | 0.28 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 45 | 0.28 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 32 | 0.28 |
| (2,226) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 48 | 0.28 |
| (2,222) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:16:ASN:H | 32 | 0.28 |
| (2,221) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 22 | 0.28 |
| (2,221) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 26 | 0.28 |
| (2,221) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 33 | 0.28 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 4 | 0.28 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 4 | 0.28 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 39 | 0.28 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 39 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 6 | 0.28 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 15 | 0.28 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 23 | 0.28 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 31 | 0.28 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 48 | 0.28 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 9 | 0.28 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 47 | 0.28 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 49 | 0.28 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 5 | 0.28 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 16 | 0.28 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 33 | 0.28 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 11 | 0.28 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 20 | 0.28 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 1 | 0.28 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 8 | 0.28 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 17 | 0.28 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 3 | 0.28 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 8 | 0.28 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 3 | 0.28 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 5 | 0.28 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 30 | 0.28 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 31 | 0.28 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 45 | 0.28 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 47 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 1 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 2 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 3 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 4 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 5 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 6 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 7 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 8 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 9 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 10 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 11 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 12 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 13 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 14 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 15 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 16 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 17 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 18 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 19 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 20 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 21 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 22 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 23 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 24 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 25 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 26 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 27 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 28 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 29 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 30 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 31 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 32 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 33 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 34 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 35 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 36 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 37 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 38 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 39 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 40 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 41 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 42 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 43 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 44 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 45 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 46 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 47 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 48 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 49 | 0.28 |
| (2,109) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 50 | 0.28 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:H | 17 | 0.28 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:H | 17 | 0.28 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:H | 47 | 0.28 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:H | 47 | 0.28 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 3 | 0.28 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 3 | 0.28 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 42 | 0.28 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 42 | 0.28 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 17 | 0.28 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 17 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 1 | 0.28 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 1 | 0.28 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 14 | 0.28 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.28 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 46 | 0.28 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 22 | 0.28 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 23 | 0.28 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 45 | 0.28 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 48 | 0.28 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 50 | 0.28 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 5 | 0.28 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 5 | 0.28 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 5 | 0.28 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 12 | 0.28 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 12 | 0.28 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 12 | 0.28 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 38 | 0.28 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 4 | 0.28 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 16 | 0.28 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 27 | 0.28 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 29 | 0.28 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 37 | 0.28 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 43 | 0.28 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 49 | 0.28 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 4 | 0.28 |
| (1,824) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 6 | 0.28 |
| (1,824) | 1:A:2:SER:HB2 | 1:A:2:SER:H | 47 | 0.28 |
| (1,82) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB3 | 33 | 0.28 |
| (1,82) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB3 | 33 | 0.28 |
| (1,819) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:16:ASN:H | 32 | 0.28 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 28 | 0.28 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 45 | 0.28 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.28 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 2 | 0.28 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 6 | 0.28 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 10 | 0.28 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 14 | 0.28 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 18 | 0.28 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 24 | 0.28 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 40 | 0.28 |
| (1,775) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 22 | 0.28 |
| (1,775) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 26 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,775) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 33 | 0.28 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 1 | 0.28 |
| (1,769) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 44 | 0.28 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 3 | 0.28 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 5 | 0.28 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 30 | 0.28 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 31 | 0.28 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 45 | 0.28 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 47 | 0.28 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 26 | 0.28 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 26 | 0.28 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 26 | 0.28 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 27 | 0.28 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 27 | 0.28 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 27 | 0.28 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 30 | 0.28 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 30 | 0.28 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 30 | 0.28 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 4 | 0.28 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 4 | 0.28 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 5 | 0.28 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 5 | 0.28 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 1 | 0.28 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 8 | 0.28 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 17 | 0.28 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 11 | 0.28 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 11 | 0.28 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 11 | 0.28 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 20 | 0.28 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 20 | 0.28 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 20 | 0.28 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 36 | 0.28 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 36 | 0.28 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 36 | 0.28 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 37 | 0.28 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 37 | 0.28 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 37 | 0.28 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 39 | 0.28 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 39 | 0.28 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 39 | 0.28 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 47 | 0.28 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 47 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 47 | 0.28 |
| (1,659) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 26 | 0.28 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 5 | 0.28 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 16 | 0.28 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 9 | 0.28 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 47 | 0.28 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 49 | 0.28 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 33 | 0.28 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 11 | 0.28 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 20 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 1 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 2 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 3 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 4 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 5 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 6 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 7 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 8 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 9 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 10 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 11 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 12 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 13 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 14 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 15 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 16 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 17 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 18 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 19 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 20 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 21 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 22 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 23 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 24 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 25 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 26 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 27 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 28 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 29 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 30 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 31 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 32 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 33 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 34 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 35 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 36 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 37 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 38 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 39 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 40 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 41 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 42 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 43 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 44 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 45 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 46 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 47 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 48 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 49 | 0.28 |
| (1,638) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HB3 | 50 | 0.28 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 6 | 0.28 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 6 | 0.28 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 1 | 0.28 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 3 | 0.28 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 8 | 0.28 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 4 | 0.28 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 4 | 0.28 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 39 | 0.28 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 39 | 0.28 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 3 | 0.28 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 3 | 0.28 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 3 | 0.28 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 1 | 0.28 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 7 | 0.28 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 28 | 0.28 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 32 | 0.28 |
| (1,527) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 48 | 0.28 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 6 | 0.28 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 15 | 0.28 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 23 | 0.28 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 31 | 0.28 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 48 | 0.28 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 3 | 0.28 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 3 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 12 | 0.28 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 12 | 0.28 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 25 | 0.28 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 25 | 0.28 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 26 | 0.28 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 26 | 0.28 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 29 | 0.28 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 29 | 0.28 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 35 | 0.28 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 35 | 0.28 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 41 | 0.28 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 41 | 0.28 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 43 | 0.28 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 43 | 0.28 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 47 | 0.28 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 47 | 0.28 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 48 | 0.28 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 48 | 0.28 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 13 | 0.28 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 13 | 0.28 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 30 | 0.28 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 30 | 0.28 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 37 | 0.28 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 37 | 0.28 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 30 | 0.28 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 5 | 0.28 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 24 | 0.28 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 28 | 0.28 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 2 | 0.28 |
| (1,497) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 24 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 1 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 2 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 3 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 4 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 5 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 6 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 7 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 8 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 9 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 10 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 11 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 12 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 13 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 14 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 15 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 16 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 17 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 18 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 19 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 20 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 21 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 22 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 23 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 24 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 25 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 26 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 27 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 28 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 29 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 30 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 31 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 32 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 33 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 34 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 35 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 36 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 37 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 38 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 39 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 40 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 41 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 42 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 43 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 44 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 45 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 46 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 47 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 48 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 49 | 0.28 |
| (1,470) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:HB3 | 50 | 0.28 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 40 | 0.28 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 48 | 0.28 |
| (1,414) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:5:GLN:HB3 | 15 | 0.28 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 32 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,378) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 11 | 0.28 |
| (1,378) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 35 | 0.28 |
| (1,378) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 44 | 0.28 |
| (1,305) | 1:A:17:LYS:H | 1:A:14:ASN:HA | 40 | 0.28 |
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 6 | 0.28 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 45 | 0.28 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 39 | 0.28 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 32 | 0.28 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 4 | 0.28 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 4 | 0.28 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 4 | 0.28 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 11 | 0.28 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 11 | 0.28 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 11 | 0.28 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 31 | 0.28 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 31 | 0.28 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 31 | 0.28 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 41 | 0.28 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 41 | 0.28 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 41 | 0.28 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 3 | 0.28 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 12 | 0.28 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 22 | 0.28 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 30 | 0.28 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 44 | 0.28 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 50 | 0.28 |
| (1,196) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:HA | 31 | 0.28 |
| (1,194) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 18 | 0.28 |
| (1,194) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 18 | 0.28 |
| (1,194) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 18 | 0.28 |
| (1,194) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG11 | 18 | 0.28 |
| (1,194) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG13 | 18 | 0.28 |
| (1,194) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG12 | 18 | 0.28 |
| (1,194) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 18 | 0.28 |
| (1,194) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 18 | 0.28 |
| (1,194) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 18 | 0.28 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 17 | 0.28 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 17 | 0.28 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 17 | 0.28 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 32 | 0.28 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 32 | 0.28 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 32 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 5 | 0.28 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 5 | 0.28 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 5 | 0.28 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 6 | 0.28 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 6 | 0.28 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 6 | 0.28 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 10 | 0.28 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 49 | 0.28 |
| (1,159) | 1:A:18:VAL:HB | 1:A:19:PRO:HD3 | 40 | 0.28 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 39 | 0.28 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 7 | 0.28 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 7 | 0.28 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 7 | 0.28 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 13 | 0.28 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 13 | 0.28 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 13 | 0.28 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 3 | 0.28 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 6 | 0.28 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 11 | 0.28 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 12 | 0.28 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 19 | 0.28 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 22 | 0.28 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 29 | 0.28 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 44 | 0.28 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 32 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 6 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 6 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 6 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 6 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 6 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 6 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 8 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 8 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 8 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 8 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 8 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 8 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 29 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 29 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 29 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 29 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 29 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 29 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 39 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 39 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 39 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 39 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 39 | 0.28 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 39 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 2 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 2 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 8 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 8 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 16 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 16 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 18 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 18 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 26 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 26 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 27 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 27 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 29 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 29 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 34 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 34 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 37 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 37 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 39 | 0.28 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 39 | 0.28 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB2 | 44 | 0.28 |
| (1,1035) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 44 | 0.28 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 44 | 0.28 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:26:MET:HB2 | 44 | 0.28 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 44 | 0.28 |
| (1,1035) | 1:A:25:GLN:HG3 | 1:A:25:GLN:HB3 | 44 | 0.28 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 7 | 0.28 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 7 | 0.28 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 31 | 0.28 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 31 | 0.28 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 42 | 0.28 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 42 | 0.28 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 43 | 0.28 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 43 | 0.28 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 1 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 1 | 0.28 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 10 | 0.28 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 10 | 0.28 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 12 | 0.28 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 12 | 0.28 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 41 | 0.28 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 41 | 0.28 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 20 | 0.27 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.27 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.27 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.27 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.27 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 7 | 0.27 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 8 | 0.27 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 11 | 0.27 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 12 | 0.27 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 16 | 0.27 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 26 | 0.27 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 27 | 0.27 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 37 | 0.27 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 46 | 0.27 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 5 | 0.27 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 18 | 0.27 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 41 | 0.27 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 19 | 0.27 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 19 | 0.27 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 35 | 0.27 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 7 | 0.27 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 7 | 0.27 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 24 | 0.27 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 24 | 0.27 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 19 | 0.27 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 21 | 0.27 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 27 | 0.27 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 29 | 0.27 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 39 | 0.27 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 44 | 0.27 |
| (2,800) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 2 | 0.27 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 4 | 0.27 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 14 | 0.27 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 37 | 0.27 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 49 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,785) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB2 | 38 | 0.27 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 19 | 0.27 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 20 | 0.27 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 24 | 0.27 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 36 | 0.27 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 38 | 0.27 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 40 | 0.27 |
| (2,767) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 41 | 0.27 |
| (2,767) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 41 | 0.27 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 8 | 0.27 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 15 | 0.27 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 39 | 0.27 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 35 | 0.27 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 35 | 0.27 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 35 | 0.27 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 39 | 0.27 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 39 | 0.27 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 39 | 0.27 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 47 | 0.27 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 47 | 0.27 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 47 | 0.27 |
| (2,702) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 22 | 0.27 |
| (2,702) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 45 | 0.27 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 2 | 0.27 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 4 | 0.27 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 16 | 0.27 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 25 | 0.27 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 38 | 0.27 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 48 | 0.27 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.27 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.27 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.27 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 26 | 0.27 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 26 | 0.27 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 26 | 0.27 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 32 | 0.27 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 32 | 0.27 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 32 | 0.27 |
| (2,682) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 33 | 0.27 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.27 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.27 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 20 | 0.27 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 20 | 0.27 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 20 | 0.27 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 6 | 0.27 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 6 | 0.27 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 6 | 0.27 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 11 | 0.27 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 11 | 0.27 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 11 | 0.27 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 49 | 0.27 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 49 | 0.27 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 49 | 0.27 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 10 | 0.27 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 11 | 0.27 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 12 | 0.27 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 30 | 0.27 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 35 | 0.27 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 41 | 0.27 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 46 | 0.27 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 48 | 0.27 |
| (2,667) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 15 | 0.27 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 12 | 0.27 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 23 | 0.27 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 30 | 0.27 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 10 | 0.27 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 12 | 0.27 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 44 | 0.27 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 9 | 0.27 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 9 | 0.27 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 12 | 0.27 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 12 | 0.27 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 13 | 0.27 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 13 | 0.27 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 36 | 0.27 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 44 | 0.27 |
| (2,65) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 47 | 0.27 |
| (2,65) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 47 | 0.27 |
| (2,65) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 47 | 0.27 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 14 | 0.27 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 37 | 0.27 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 23 | 0.27 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 40 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,601) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 40 | 0.27 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 7 | 0.27 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 8 | 0.27 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 11 | 0.27 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 12 | 0.27 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 16 | 0.27 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 26 | 0.27 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 27 | 0.27 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 37 | 0.27 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 46 | 0.27 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 30 | 0.27 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 30 | 0.27 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 30 | 0.27 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 47 | 0.27 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 47 | 0.27 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 47 | 0.27 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 6 | 0.27 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 6 | 0.27 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 6 | 0.27 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 11 | 0.27 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 11 | 0.27 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 11 | 0.27 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 49 | 0.27 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 49 | 0.27 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 49 | 0.27 |
| (2,564) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 47 | 0.27 |
| (2,564) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 47 | 0.27 |
| (2,564) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 47 | 0.27 |
| (2,554) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 15 | 0.27 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 4 | 0.27 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 4 | 0.27 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 5 | 0.27 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 5 | 0.27 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 20 | 0.27 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 20 | 0.27 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 49 | 0.27 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 49 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 1 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 2 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 3 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 4 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 5 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 7 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 8 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 9 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 10 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 11 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 12 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 13 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 14 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 16 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 17 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 18 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 19 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 20 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 21 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 22 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 24 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 25 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 26 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 27 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 28 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 29 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 30 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 32 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 33 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 34 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 35 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 36 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 37 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 38 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 39 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 40 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 41 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 42 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 43 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 45 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 46 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 47 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 49 | 0.27 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 50 | 0.27 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 9 | 0.27 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 9 | 0.27 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 42 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 42 | 0.27 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 44 | 0.27 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 44 | 0.27 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 31 | 0.27 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 29 | 0.27 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 35 | 0.27 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 23 | 0.27 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 23 | 0.27 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 9 | 0.27 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 9 | 0.27 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 42 | 0.27 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 42 | 0.27 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 44 | 0.27 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 44 | 0.27 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 31 | 0.27 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.27 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.27 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.27 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.27 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 36 | 0.27 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 44 | 0.27 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 29 | 0.27 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 35 | 0.27 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.27 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.27 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.27 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 19 | 0.27 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 21 | 0.27 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 27 | 0.27 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 29 | 0.27 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 39 | 0.27 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 44 | 0.27 |
| (2,390) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 22 | 0.27 |
| (2,390) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 45 | 0.27 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 9 | 0.27 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 9 | 0.27 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 12 | 0.27 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 12 | 0.27 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 13 | 0.27 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 13 | 0.27 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 35 | 0.27 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 35 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 35 | 0.27 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 39 | 0.27 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 39 | 0.27 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 39 | 0.27 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 47 | 0.27 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 47 | 0.27 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 47 | 0.27 |
| (2,344) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 15 | 0.27 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 26 | 0.27 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 26 | 0.27 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 26 | 0.27 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 32 | 0.27 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 32 | 0.27 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 32 | 0.27 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 5 | 0.27 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 18 | 0.27 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 41 | 0.27 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 35 | 0.27 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 4 | 0.27 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 14 | 0.27 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 37 | 0.27 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 49 | 0.27 |
| (2,317) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 33 | 0.27 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 19 | 0.27 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 19 | 0.27 |
| (2,287) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB2 | 38 | 0.27 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 14 | 0.27 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 37 | 0.27 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 7 | 0.27 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 7 | 0.27 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 24 | 0.27 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 24 | 0.27 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 10 | 0.27 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 12 | 0.27 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 44 | 0.27 |
| (2,221) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 2 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 1 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 2 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 3 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 4 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 5 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 7 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 8 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 9 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 10 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 11 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 12 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 13 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 14 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 16 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 17 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 18 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 19 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 20 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 21 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 22 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 24 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 25 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 26 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 27 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 28 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 29 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 30 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 32 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 33 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 34 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 35 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 36 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 37 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 38 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 39 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 40 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 41 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 42 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 43 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 45 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 46 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 47 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 49 | 0.27 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 50 | 0.27 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 10 | 0.27 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 11 | 0.27 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 12 | 0.27 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 30 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 35 | 0.27 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 41 | 0.27 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 46 | 0.27 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 48 | 0.27 |
| (2,186) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 40 | 0.27 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 15 | 0.27 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 39 | 0.27 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 12 | 0.27 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 23 | 0.27 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 30 | 0.27 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 2 | 0.27 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 4 | 0.27 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 16 | 0.27 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 25 | 0.27 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 38 | 0.27 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 48 | 0.27 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 20 | 0.27 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 8 | 0.27 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 23 | 0.27 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 40 | 0.27 |
| (2,149) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 41 | 0.27 |
| (2,149) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 41 | 0.27 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 23 | 0.27 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 23 | 0.27 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 19 | 0.27 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 20 | 0.27 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 24 | 0.27 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 36 | 0.27 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 38 | 0.27 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 40 | 0.27 |
| (2,102) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 15 | 0.27 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 4 | 0.27 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 4 | 0.27 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 5 | 0.27 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 5 | 0.27 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 20 | 0.27 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 20 | 0.27 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 49 | 0.27 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 49 | 0.27 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:H | 8 | 0.27 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:H | 8 | 0.27 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 18 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 18 | 0.27 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 38 | 0.27 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 38 | 0.27 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 17 | 0.27 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 17 | 0.27 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 46 | 0.27 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 46 | 0.27 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 20 | 0.27 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.27 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.27 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.27 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.27 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 7 | 0.27 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 8 | 0.27 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 11 | 0.27 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 12 | 0.27 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 16 | 0.27 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 26 | 0.27 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 27 | 0.27 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 37 | 0.27 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 46 | 0.27 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 5 | 0.27 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 18 | 0.27 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 41 | 0.27 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 19 | 0.27 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 19 | 0.27 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 35 | 0.27 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 7 | 0.27 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 7 | 0.27 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 24 | 0.27 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 24 | 0.27 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 19 | 0.27 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 21 | 0.27 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 27 | 0.27 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 29 | 0.27 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 39 | 0.27 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 44 | 0.27 |
| (1,775) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 2 | 0.27 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 4 | 0.27 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 14 | 0.27 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 37 | 0.27 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 49 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,77) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:25:GLN:HA | 6 | 0.27 |
| (1,77) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:25:GLN:HA | 6 | 0.27 |
| (1,760) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB2 | 38 | 0.27 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 19 | 0.27 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 20 | 0.27 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 24 | 0.27 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 36 | 0.27 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 38 | 0.27 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 40 | 0.27 |
| (1,742) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 41 | 0.27 |
| (1,742) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 41 | 0.27 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 8 | 0.27 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 15 | 0.27 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 39 | 0.27 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 35 | 0.27 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 35 | 0.27 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 35 | 0.27 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 39 | 0.27 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 39 | 0.27 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 39 | 0.27 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 47 | 0.27 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 47 | 0.27 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 47 | 0.27 |
| (1,678) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 22 | 0.27 |
| (1,678) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 45 | 0.27 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 2 | 0.27 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 4 | 0.27 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 16 | 0.27 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 25 | 0.27 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 38 | 0.27 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 48 | 0.27 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.27 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.27 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.27 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 26 | 0.27 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 26 | 0.27 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 26 | 0.27 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 32 | 0.27 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 32 | 0.27 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 32 | 0.27 |
| (1,659) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 33 | 0.27 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 10 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 11 | 0.27 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 12 | 0.27 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 30 | 0.27 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 35 | 0.27 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 41 | 0.27 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 46 | 0.27 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 48 | 0.27 |
| (1,647) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 15 | 0.27 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 12 | 0.27 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 23 | 0.27 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 30 | 0.27 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 10 | 0.27 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 12 | 0.27 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 44 | 0.27 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 9 | 0.27 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 9 | 0.27 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 12 | 0.27 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 12 | 0.27 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 13 | 0.27 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 13 | 0.27 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 36 | 0.27 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 44 | 0.27 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 14 | 0.27 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 37 | 0.27 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 23 | 0.27 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 40 | 0.27 |
| (1,584) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 40 | 0.27 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 6 | 0.27 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 6 | 0.27 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 6 | 0.27 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 11 | 0.27 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 11 | 0.27 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 11 | 0.27 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 49 | 0.27 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 49 | 0.27 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 49 | 0.27 |
| (1,554) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 47 | 0.27 |
| (1,554) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 47 | 0.27 |
| (1,554) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 47 | 0.27 |
| (1,544) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 15 | 0.27 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 4 | 0.27 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 4 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 5 | 0.27 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 5 | 0.27 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 20 | 0.27 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 20 | 0.27 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 49 | 0.27 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 49 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 1 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 2 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 3 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 4 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 5 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 7 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 8 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 9 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 10 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 11 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 12 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 13 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 14 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 16 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 17 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 18 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 19 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 20 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 21 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 22 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 24 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 25 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 26 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 27 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 28 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 29 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 30 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 32 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 33 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 34 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 35 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 36 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 37 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 38 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 39 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 40 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 41 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 42 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 43 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 45 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 46 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 47 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 49 | 0.27 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 50 | 0.27 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 9 | 0.27 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 9 | 0.27 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 42 | 0.27 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 42 | 0.27 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 44 | 0.27 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 44 | 0.27 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 31 | 0.27 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 29 | 0.27 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 35 | 0.27 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 23 | 0.27 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 23 | 0.27 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 28 | 0.27 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 39 | 0.27 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 41 | 0.27 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 11 | 0.27 |
| (1,305) | 1:A:17:LYS:H | 1:A:14:ASN:HA | 37 | 0.27 |
| (1,262) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 36 | 0.27 |
| (1,262) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 37 | 0.27 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 27 | 0.27 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 32 | 0.27 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 21 | 0.27 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 36 | 0.27 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 44 | 0.27 |
| (1,242) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:30:LEU:HB2 | 37 | 0.27 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 24 | 0.27 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 49 | 0.27 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 17 | 0.27 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 17 | 0.27 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 17 | 0.27 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 38 | 0.27 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 38 | 0.27 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 38 | 0.27 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 42 | 0.27 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 42 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 42 | 0.27 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 50 | 0.27 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 50 | 0.27 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 50 | 0.27 |
| (1,230) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:25:GLN:HG3 | 34 | 0.27 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 4 | 0.27 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 7 | 0.27 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 11 | 0.27 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 19 | 0.27 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 33 | 0.27 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 33 | 0.27 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 33 | 0.27 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 42 | 0.27 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 42 | 0.27 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 42 | 0.27 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 45 | 0.27 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 45 | 0.27 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 45 | 0.27 |
| (1,180) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:17:LYS:HA | 37 | 0.27 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 39 | 0.27 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 39 | 0.27 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 39 | 0.27 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 1 | 0.27 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 5 | 0.27 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 8 | 0.27 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 11 | 0.27 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 17 | 0.27 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 21 | 0.27 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 24 | 0.27 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 26 | 0.27 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 28 | 0.27 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 29 | 0.27 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 35 | 0.27 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 44 | 0.27 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 45 | 0.27 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 46 | 0.27 |
| (1,150) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 1 | 0.27 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 8 | 0.27 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 10 | 0.27 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 23 | 0.27 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 31 | 0.27 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 33 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 40 | 0.27 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 48 | 0.27 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 50 | 0.27 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 10 | 0.27 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 19 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 1 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 5 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 7 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 13 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 17 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 19 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 21 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 22 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 23 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 24 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 26 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 31 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 33 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 34 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 35 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 36 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 39 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 43 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 46 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 49 | 0.27 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 50 | 0.27 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 38 | 0.27 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 38 | 0.27 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 38 | 0.27 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 38 | 0.27 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 38 | 0.27 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 38 | 0.27 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 48 | 0.27 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 48 | 0.27 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 48 | 0.27 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 48 | 0.27 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 48 | 0.27 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 48 | 0.27 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 11 | 0.27 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 11 | 0.27 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 22 | 0.27 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 22 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 34 | 0.27 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 34 | 0.27 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 46 | 0.27 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 46 | 0.27 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 49 | 0.27 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 49 | 0.27 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 1 | 0.27 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 1 | 0.27 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 6 | 0.27 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 6 | 0.27 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 20 | 0.27 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 20 | 0.27 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 19 | 0.27 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 19 | 0.27 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 20 | 0.27 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 20 | 0.27 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 23 | 0.27 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 23 | 0.27 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 32 | 0.27 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 32 | 0.27 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 8 | 0.26 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 38 | 0.26 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 38 | 0.26 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 45 | 0.26 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.26 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 18 | 0.26 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.26 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 2 | 0.26 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 19 | 0.26 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 24 | 0.26 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 29 | 0.26 |
| (2,892) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 40 | 0.26 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 19 | 0.26 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 5 | 0.26 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 5 | 0.26 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 31 | 0.26 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 31 | 0.26 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 47 | 0.26 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 47 | 0.26 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 22 | 0.26 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 22 | 0.26 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 22 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 14 | 0.26 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 32 | 0.26 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 14 | 0.26 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 38 | 0.26 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 38 | 0.26 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 26 | 0.26 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 23 | 0.26 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 23 | 0.26 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 23 | 0.26 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 3 | 0.26 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 4 | 0.26 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 9 | 0.26 |
| (2,800) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 10 | 0.26 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 25 | 0.26 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 40 | 0.26 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 45 | 0.26 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 46 | 0.26 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 16 | 0.26 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 32 | 0.26 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 41 | 0.26 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 43 | 0.26 |
| (2,794) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 11 | 0.26 |
| (2,794) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 42 | 0.26 |
| (2,779) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HD1 | 15 | 0.26 |
| (2,779) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HD2 | 15 | 0.26 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 6 | 0.26 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 10 | 0.26 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 16 | 0.26 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 22 | 0.26 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 23 | 0.26 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 29 | 0.26 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 39 | 0.26 |
| (2,76) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 18 | 0.26 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 12 | 0.26 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 12 | 0.26 |
| (2,720) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 12 | 0.26 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 19 | 0.26 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 19 | 0.26 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 27 | 0.26 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 27 | 0.26 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 39 | 0.26 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 39 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 42 | 0.26 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 42 | 0.26 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 44 | 0.26 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 20 | 0.26 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.26 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.26 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.26 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 23 | 0.26 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 23 | 0.26 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 23 | 0.26 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 34 | 0.26 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 34 | 0.26 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 34 | 0.26 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 42 | 0.26 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 42 | 0.26 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 42 | 0.26 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.26 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 39 | 0.26 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 39 | 0.26 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 39 | 0.26 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 40 | 0.26 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 40 | 0.26 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 40 | 0.26 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 0.26 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 0.26 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 0.26 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 21 | 0.26 |
| (2,656) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HB3 | 49 | 0.26 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 32 | 0.26 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 32 | 0.26 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 34 | 0.26 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 34 | 0.26 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 37 | 0.26 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 37 | 0.26 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 30 | 0.26 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 30 | 0.26 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 30 | 0.26 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 5 | 0.26 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 6 | 0.26 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 15 | 0.26 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 24 | 0.26 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 47 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 41 | 0.26 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 18 | 0.26 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 37 | 0.26 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 39 | 0.26 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 7 | 0.26 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 7 | 0.26 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 23 | 0.26 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 23 | 0.26 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 2 | 0.26 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 19 | 0.26 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 24 | 0.26 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 29 | 0.26 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 2 | 0.26 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 2 | 0.26 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 2 | 0.26 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 0.26 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 0.26 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 0.26 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 30 | 0.26 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 30 | 0.26 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 30 | 0.26 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 25 | 0.26 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 40 | 0.26 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 45 | 0.26 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 46 | 0.26 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 6 | 0.26 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 6 | 0.26 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 9 | 0.26 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 9 | 0.26 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 30 | 0.26 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 30 | 0.26 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 32 | 0.26 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 32 | 0.26 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 38 | 0.26 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 38 | 0.26 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 40 | 0.26 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 40 | 0.26 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 30 | 0.26 |
| (2,536) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 44 | 0.26 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 2 | 0.26 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 2 | 0.26 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 33 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 33 | 0.26 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 50 | 0.26 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 50 | 0.26 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 15 | 0.26 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 41 | 0.26 |
| (2,49) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HD1 | 15 | 0.26 |
| (2,49) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HD2 | 15 | 0.26 |
| (2,476) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 18 | 0.26 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 19 | 0.26 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 19 | 0.26 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 27 | 0.26 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 27 | 0.26 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 39 | 0.26 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 39 | 0.26 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 42 | 0.26 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 42 | 0.26 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 2 | 0.26 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 2 | 0.26 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 45 | 0.26 |
| (2,461) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 11 | 0.26 |
| (2,461) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 42 | 0.26 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 33 | 0.26 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 33 | 0.26 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 50 | 0.26 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 50 | 0.26 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.26 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 18 | 0.26 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.26 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 15 | 0.26 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 41 | 0.26 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.26 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.26 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.26 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 44 | 0.26 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 3 | 0.26 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 4 | 0.26 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 9 | 0.26 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 32 | 0.26 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 32 | 0.26 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 34 | 0.26 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 34 | 0.26 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 37 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 37 | 0.26 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 12 | 0.26 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 12 | 0.26 |
| (2,366) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 12 | 0.26 |
| (2,33) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 40 | 0.26 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 34 | 0.26 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 34 | 0.26 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 34 | 0.26 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 42 | 0.26 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 42 | 0.26 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 42 | 0.26 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 19 | 0.26 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 14 | 0.26 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 14 | 0.26 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 32 | 0.26 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 26 | 0.26 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 16 | 0.26 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 32 | 0.26 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 41 | 0.26 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 43 | 0.26 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 5 | 0.26 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 5 | 0.26 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 31 | 0.26 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 31 | 0.26 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 47 | 0.26 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 47 | 0.26 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 41 | 0.26 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 5 | 0.26 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 6 | 0.26 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 15 | 0.26 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 24 | 0.26 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 47 | 0.26 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 22 | 0.26 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 22 | 0.26 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 22 | 0.26 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 30 | 0.26 |
| (2,221) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 10 | 0.26 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 7 | 0.26 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 7 | 0.26 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 23 | 0.26 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 23 | 0.26 |
| (2,215) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 44 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 21 | 0.26 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 20 | 0.26 |
| (2,161) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HB3 | 49 | 0.26 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 8 | 0.26 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 18 | 0.26 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 37 | 0.26 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 39 | 0.26 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 6 | 0.26 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 10 | 0.26 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 16 | 0.26 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 22 | 0.26 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 23 | 0.26 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 29 | 0.26 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 39 | 0.26 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 6 | 0.26 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 6 | 0.26 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 9 | 0.26 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 9 | 0.26 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 30 | 0.26 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 30 | 0.26 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 32 | 0.26 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 32 | 0.26 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 38 | 0.26 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 38 | 0.26 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 40 | 0.26 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 40 | 0.26 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 19 | 0.26 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 19 | 0.26 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 30 | 0.26 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 30 | 0.26 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 25 | 0.26 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 25 | 0.26 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 34 | 0.26 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 34 | 0.26 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 48 | 0.26 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 48 | 0.26 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 18 | 0.26 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 18 | 0.26 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 8 | 0.26 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 38 | 0.26 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 38 | 0.26 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 45 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.26 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 18 | 0.26 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 26 | 0.26 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 2 | 0.26 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 19 | 0.26 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 24 | 0.26 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 29 | 0.26 |
| (1,866) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 40 | 0.26 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 19 | 0.26 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 5 | 0.26 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 5 | 0.26 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 31 | 0.26 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 31 | 0.26 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 47 | 0.26 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 47 | 0.26 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 22 | 0.26 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 22 | 0.26 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 22 | 0.26 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 14 | 0.26 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 32 | 0.26 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 14 | 0.26 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 26 | 0.26 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 10 | 0.26 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 10 | 0.26 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 23 | 0.26 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 23 | 0.26 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 23 | 0.26 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 3 | 0.26 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 4 | 0.26 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 9 | 0.26 |
| (1,775) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HD21 | 10 | 0.26 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 16 | 0.26 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 32 | 0.26 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 41 | 0.26 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 43 | 0.26 |
| (1,769) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 11 | 0.26 |
| (1,769) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 42 | 0.26 |
| (1,754) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HD1 | 15 | 0.26 |
| (1,754) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HD2 | 15 | 0.26 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 6 | 0.26 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 10 | 0.26 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 16 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 22 | 0.26 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 23 | 0.26 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 29 | 0.26 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 39 | 0.26 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE1 | 12 | 0.26 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE2 | 12 | 0.26 |
| (1,696) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HE3 | 12 | 0.26 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 19 | 0.26 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 19 | 0.26 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 27 | 0.26 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 27 | 0.26 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 39 | 0.26 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 39 | 0.26 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 42 | 0.26 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 42 | 0.26 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 44 | 0.26 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 20 | 0.26 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.26 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.26 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 34 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 34 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 34 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 42 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 42 | 0.26 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 42 | 0.26 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 21 | 0.26 |
| (1,637) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:12:GLN:HB3 | 49 | 0.26 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 32 | 0.26 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 32 | 0.26 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 34 | 0.26 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 34 | 0.26 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 37 | 0.26 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 37 | 0.26 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 5 | 0.26 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 6 | 0.26 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 15 | 0.26 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 24 | 0.26 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 47 | 0.26 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 41 | 0.26 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 18 | 0.26 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 37 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 39 | 0.26 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 7 | 0.26 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 7 | 0.26 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 23 | 0.26 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 23 | 0.26 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 0.26 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 0.26 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 0.26 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 30 | 0.26 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 30 | 0.26 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 30 | 0.26 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 25 | 0.26 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 40 | 0.26 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 45 | 0.26 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 46 | 0.26 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 6 | 0.26 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 6 | 0.26 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 9 | 0.26 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 9 | 0.26 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 30 | 0.26 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 30 | 0.26 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 32 | 0.26 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 32 | 0.26 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 38 | 0.26 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 38 | 0.26 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 40 | 0.26 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 40 | 0.26 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 30 | 0.26 |
| (1,526) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:HB3 | 44 | 0.26 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 2 | 0.26 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 2 | 0.26 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 33 | 0.26 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 33 | 0.26 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 50 | 0.26 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 50 | 0.26 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 15 | 0.26 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 41 | 0.26 |
| (1,466) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 18 | 0.26 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 5 | 0.26 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 32 | 0.26 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 12 | 0.26 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 18 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,323) | 1:A:27:CYS:H | 1:A:26:MET:HE3 | 43 | 0.26 |
| (1,323) | 1:A:27:CYS:H | 1:A:26:MET:HE1 | 43 | 0.26 |
| (1,323) | 1:A:27:CYS:H | 1:A:26:MET:HE2 | 43 | 0.26 |
| (1,283) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:11:GLU:HB2 | 15 | 0.26 |
| (1,283) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:11:GLU:HB2 | 25 | 0.26 |
| (1,262) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 7 | 0.26 |
| (1,262) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 21 | 0.26 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 13 | 0.26 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 28 | 0.26 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 31 | 0.26 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 36 | 0.26 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 40 | 0.26 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 5 | 0.26 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 5 | 0.26 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 5 | 0.26 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 14 | 0.26 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 14 | 0.26 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 14 | 0.26 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 22 | 0.26 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 22 | 0.26 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 22 | 0.26 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 23 | 0.26 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 23 | 0.26 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 23 | 0.26 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 25 | 0.26 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 25 | 0.26 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 25 | 0.26 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 34 | 0.26 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 27 | 0.26 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 27 | 0.26 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 27 | 0.26 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 39 | 0.26 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 39 | 0.26 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 39 | 0.26 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 19 | 0.26 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 19 | 0.26 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 19 | 0.26 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 28 | 0.26 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 28 | 0.26 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 28 | 0.26 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 37 | 0.26 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 37 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 37 | 0.26 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 40 | 0.26 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 40 | 0.26 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 40 | 0.26 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 8 | 0.26 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 11 | 0.26 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 14 | 0.26 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 19 | 0.26 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 1 | 0.26 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 1 | 0.26 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 1 | 0.26 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 34 | 0.26 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 34 | 0.26 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 34 | 0.26 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 3 | 0.26 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 14 | 0.26 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 22 | 0.26 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 25 | 0.26 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 27 | 0.26 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 31 | 0.26 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 36 | 0.26 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 37 | 0.26 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 50 | 0.26 |
| (1,150) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 11 | 0.26 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 1 | 0.26 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 21 | 0.26 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 38 | 0.26 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 49 | 0.26 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 5 | 0.26 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 41 | 0.26 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 42 | 0.26 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD22 | 1:A:30:LEU:HA | 30 | 0.26 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD21 | 1:A:30:LEU:HA | 30 | 0.26 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD23 | 1:A:30:LEU:HA | 30 | 0.26 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 40 | 0.26 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 40 | 0.26 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 40 | 0.26 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 40 | 0.26 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 40 | 0.26 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 40 | 0.26 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 9 | 0.26 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 9 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 17 | 0.26 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 17 | 0.26 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 45 | 0.26 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 45 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 1 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 1 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 6 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 6 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 9 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 9 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 10 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 10 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 12 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 12 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 13 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 13 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 14 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 14 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 15 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 15 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 19 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 19 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 20 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 20 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 21 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 21 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 22 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 22 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 23 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 23 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 25 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 25 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 28 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 28 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 31 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 31 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 36 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 36 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 38 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 38 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 40 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 40 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 41 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 41 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 42 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 42 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 47 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 47 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 48 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 48 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 49 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 49 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 50 | 0.26 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 50 | 0.26 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 11 | 0.26 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 11 | 0.26 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 15 | 0.26 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 15 | 0.26 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 38 | 0.26 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 38 | 0.26 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 49 | 0.25 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 5 | 0.25 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 47 | 0.25 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 29 | 0.25 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 48 | 0.25 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 35 | 0.25 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.25 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 28 | 0.25 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 35 | 0.25 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 36 | 0.25 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 20 | 0.25 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 21 | 0.25 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 30 | 0.25 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 31 | 0.25 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 50 | 0.25 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 17 | 0.25 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 17 | 0.25 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 25 | 0.25 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 25 | 0.25 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 27 | 0.25 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 27 | 0.25 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 48 | 0.25 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 48 | 0.25 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 49 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 49 | 0.25 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 39 | 0.25 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 39 | 0.25 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 39 | 0.25 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 47 | 0.25 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 1 | 0.25 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 29 | 0.25 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 39 | 0.25 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.25 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 33 | 0.25 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 39 | 0.25 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 47 | 0.25 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 23 | 0.25 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 34 | 0.25 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 38 | 0.25 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 40 | 0.25 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 47 | 0.25 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 48 | 0.25 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 20 | 0.25 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 30 | 0.25 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 37 | 0.25 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 3 | 0.25 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 14 | 0.25 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 24 | 0.25 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 8 | 0.25 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 21 | 0.25 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 36 | 0.25 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 42 | 0.25 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 17 | 0.25 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 18 | 0.25 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 48 | 0.25 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 7 | 0.25 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 1 | 0.25 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 17 | 0.25 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 40 | 0.25 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 40 | 0.25 |
| (2,702) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 30 | 0.25 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 3 | 0.25 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 11 | 0.25 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 40 | 0.25 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 5 | 0.25 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 5 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 5 | 0.25 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 4 | 0.25 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 6 | 0.25 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 16 | 0.25 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 17 | 0.25 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 21 | 0.25 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 34 | 0.25 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG21 | 1:A:12:GLN:HE22 | 12 | 0.25 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG22 | 1:A:12:GLN:HE22 | 12 | 0.25 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG23 | 1:A:12:GLN:HE22 | 12 | 0.25 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG21 | 1:A:12:GLN:HE22 | 16 | 0.25 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG22 | 1:A:12:GLN:HE22 | 16 | 0.25 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG23 | 1:A:12:GLN:HE22 | 16 | 0.25 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 7 | 0.25 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 19 | 0.25 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 24 | 0.25 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 29 | 0.25 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 35 | 0.25 |
| (2,655) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 38 | 0.25 |
| (2,654) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 18 | 0.25 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 21 | 0.25 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 21 | 0.25 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 24 | 0.25 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 24 | 0.25 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 36 | 0.25 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 36 | 0.25 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 41 | 0.25 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 41 | 0.25 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 33 | 0.25 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 40 | 0.25 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 30 | 0.25 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 16 | 0.25 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 34 | 0.25 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 49 | 0.25 |
| (2,631) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 37 | 0.25 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 21 | 0.25 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 29 | 0.25 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 30 | 0.25 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 12 | 0.25 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 15 | 0.25 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 21 | 0.25 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 47 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 47 | 0.25 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 28 | 0.25 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 35 | 0.25 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 36 | 0.25 |
| (2,570) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 18 | 0.25 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 33 | 0.25 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 38 | 0.25 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 3 | 0.25 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 14 | 0.25 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 24 | 0.25 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 1 | 0.25 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 1 | 0.25 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 14 | 0.25 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 14 | 0.25 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 17 | 0.25 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 17 | 0.25 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 18 | 0.25 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 18 | 0.25 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 43 | 0.25 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 43 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 1 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 2 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 3 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 4 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 5 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 6 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 7 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 8 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 9 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 10 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 11 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 12 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 13 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 14 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 15 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 16 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 17 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 18 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 19 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 20 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 21 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 22 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 23 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 24 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 25 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 26 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 27 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 28 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 29 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 31 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 32 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 33 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 34 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 35 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 36 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 37 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 38 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 39 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 40 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 41 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 42 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 43 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 44 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 45 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 46 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 47 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 48 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 49 | 0.25 |
| (2,540) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 50 | 0.25 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 1 | 0.25 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 24 | 0.25 |
| (2,528) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 17 | 0.25 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 14 | 0.25 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 22 | 0.25 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 48 | 0.25 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 49 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 1 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 2 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 3 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 4 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 5 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 6 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 7 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 8 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 9 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 10 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 11 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 12 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 13 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 14 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 15 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 16 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 17 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 18 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 19 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 20 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 21 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 22 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 23 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 24 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 25 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 26 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 27 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 28 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 29 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 30 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 31 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 32 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 33 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 34 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 35 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 36 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 37 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 38 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 39 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 40 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 41 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 42 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 43 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 44 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 45 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 46 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 47 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 48 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 49 | 0.25 |
| (2,525) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 50 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 1 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 2 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 3 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 4 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 5 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 6 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 7 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 8 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 9 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 10 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 11 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 12 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 13 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 14 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 15 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 16 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 17 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 18 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 19 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 20 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 21 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 22 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 23 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 24 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 25 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 26 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 27 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 28 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 29 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 30 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 31 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 32 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 33 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 34 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 35 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 36 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 37 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 38 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 39 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 40 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 41 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 42 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 43 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 44 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 45 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 46 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 47 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 48 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 49 | 0.25 |
| (2,512) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 50 | 0.25 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 33 | 0.25 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 38 | 0.25 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 29 | 0.25 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 48 | 0.25 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 1 | 0.25 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 24 | 0.25 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 35 | 0.25 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.25 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 33 | 0.25 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 40 | 0.25 |
| (2,442) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 17 | 0.25 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 14 | 0.25 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 22 | 0.25 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 48 | 0.25 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 49 | 0.25 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 30 | 0.25 |
| (2,428) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 37 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 1 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 2 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 3 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 4 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 5 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 6 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 7 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 8 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 9 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 10 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 11 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 12 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 13 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 14 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 15 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 16 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 17 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 18 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 19 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 20 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 21 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 22 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 23 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 24 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 25 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 26 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 27 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 28 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 29 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 30 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 31 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 32 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 33 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 34 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 35 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 36 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 37 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 38 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 39 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 40 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 41 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 42 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 43 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 44 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 45 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 46 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 47 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 48 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 49 | 0.25 |
| (2,423) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 50 | 0.25 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 23 | 0.25 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 34 | 0.25 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 38 | 0.25 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 40 | 0.25 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 47 | 0.25 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 48 | 0.25 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 1 | 0.25 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 17 | 0.25 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 20 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 30 | 0.25 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 37 | 0.25 |
| (2,390) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 30 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 1 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 2 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 3 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 4 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 5 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 6 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 7 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 8 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 9 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 10 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 11 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 12 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 13 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 14 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 15 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 16 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 17 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 18 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 19 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 20 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 21 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 22 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 23 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 24 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 25 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 26 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 27 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 28 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 29 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 30 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 31 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 32 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 33 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 34 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 35 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 36 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 37 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 38 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 39 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 40 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 41 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 42 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 43 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 44 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 45 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 46 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 47 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 48 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 49 | 0.25 |
| (2,387) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 50 | 0.25 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 21 | 0.25 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 21 | 0.25 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 24 | 0.25 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 24 | 0.25 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 36 | 0.25 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 36 | 0.25 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 41 | 0.25 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 41 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 20 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 21 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 30 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 31 | 0.25 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 50 | 0.25 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 29 | 0.25 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 1 | 0.25 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 33 | 0.25 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 39 | 0.25 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 47 | 0.25 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 8 | 0.25 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 21 | 0.25 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 36 | 0.25 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 42 | 0.25 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 47 | 0.25 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 17 | 0.25 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 17 | 0.25 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 25 | 0.25 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 25 | 0.25 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 27 | 0.25 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 27 | 0.25 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 48 | 0.25 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 48 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 49 | 0.25 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 49 | 0.25 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 21 | 0.25 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 29 | 0.25 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 30 | 0.25 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 16 | 0.25 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 34 | 0.25 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 49 | 0.25 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 40 | 0.25 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 40 | 0.25 |
| (2,257) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 18 | 0.25 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.25 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 39 | 0.25 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 39 | 0.25 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 39 | 0.25 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 39 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 1 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 2 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 3 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 4 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 5 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 6 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 7 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 8 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 9 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 10 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 11 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 12 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 13 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 14 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 15 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 16 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 17 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 18 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 19 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 20 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 21 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 22 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 23 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 24 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 25 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 26 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 27 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 28 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 29 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 31 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 32 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 33 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 34 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 35 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 36 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 37 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 38 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 39 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 40 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 41 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 42 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 43 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 44 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 45 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 46 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 47 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 48 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 49 | 0.25 |
| (2,229) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 50 | 0.25 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 47 | 0.25 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 47 | 0.25 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 4 | 0.25 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 6 | 0.25 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 16 | 0.25 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 17 | 0.25 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 21 | 0.25 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 34 | 0.25 |
| (2,198) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 38 | 0.25 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 7 | 0.25 |
| (2,181) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 18 | 0.25 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 40 | 0.25 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 7 | 0.25 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 19 | 0.25 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 24 | 0.25 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 29 | 0.25 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 35 | 0.25 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 3 | 0.25 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 11 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 49 | 0.25 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 5 | 0.25 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 47 | 0.25 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 21 | 0.25 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 12 | 0.25 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 15 | 0.25 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 17 | 0.25 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 18 | 0.25 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 48 | 0.25 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 1 | 0.25 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 1 | 0.25 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 14 | 0.25 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 14 | 0.25 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 17 | 0.25 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 17 | 0.25 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 18 | 0.25 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 18 | 0.25 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 43 | 0.25 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 43 | 0.25 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 7 | 0.25 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 7 | 0.25 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 14 | 0.25 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 14 | 0.25 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 16 | 0.25 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 16 | 0.25 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 6 | 0.25 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 6 | 0.25 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 21 | 0.25 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 21 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 8 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 8 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 10 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 10 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 12 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 12 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 14 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 14 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 22 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 22 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 30 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 30 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 32 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 32 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 38 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 38 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 39 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 39 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 43 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 43 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 44 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 44 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 49 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 49 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 50 | 0.25 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 50 | 0.25 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 30 | 0.25 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 30 | 0.25 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 49 | 0.25 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 5 | 0.25 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 47 | 0.25 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 29 | 0.25 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 48 | 0.25 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 35 | 0.25 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.25 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 28 | 0.25 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 35 | 0.25 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 36 | 0.25 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 20 | 0.25 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 21 | 0.25 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 30 | 0.25 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 31 | 0.25 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 50 | 0.25 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 17 | 0.25 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 17 | 0.25 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 25 | 0.25 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 25 | 0.25 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 27 | 0.25 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 27 | 0.25 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 48 | 0.25 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 48 | 0.25 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 49 | 0.25 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 49 | 0.25 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 39 | 0.25 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 39 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 39 | 0.25 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 47 | 0.25 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 1 | 0.25 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 29 | 0.25 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 39 | 0.25 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.25 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 33 | 0.25 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 39 | 0.25 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 47 | 0.25 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 23 | 0.25 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 34 | 0.25 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 38 | 0.25 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 40 | 0.25 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 47 | 0.25 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 48 | 0.25 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 20 | 0.25 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 30 | 0.25 |
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 37 | 0.25 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 8 | 0.25 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 21 | 0.25 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 36 | 0.25 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 42 | 0.25 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 17 | 0.25 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 18 | 0.25 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 48 | 0.25 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 7 | 0.25 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 1 | 0.25 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 17 | 0.25 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 40 | 0.25 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 40 | 0.25 |
| (1,678) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 30 | 0.25 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 3 | 0.25 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 11 | 0.25 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 40 | 0.25 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 4 | 0.25 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 6 | 0.25 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 16 | 0.25 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 17 | 0.25 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 21 | 0.25 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 34 | 0.25 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 7 | 0.25 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 19 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 24 | 0.25 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 29 | 0.25 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 35 | 0.25 |
| (1,636) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 38 | 0.25 |
| (1,635) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HD2 | 18 | 0.25 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 21 | 0.25 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 21 | 0.25 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 24 | 0.25 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 24 | 0.25 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 36 | 0.25 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 36 | 0.25 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 41 | 0.25 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 41 | 0.25 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 33 | 0.25 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 40 | 0.25 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 30 | 0.25 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 16 | 0.25 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 34 | 0.25 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 49 | 0.25 |
| (1,612) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:H | 37 | 0.25 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 21 | 0.25 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 29 | 0.25 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 30 | 0.25 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 12 | 0.25 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 15 | 0.25 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 21 | 0.25 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 47 | 0.25 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 47 | 0.25 |
| (1,559) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 18 | 0.25 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 33 | 0.25 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 38 | 0.25 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 3 | 0.25 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 14 | 0.25 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 24 | 0.25 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 1 | 0.25 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 1 | 0.25 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 14 | 0.25 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 14 | 0.25 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 17 | 0.25 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 17 | 0.25 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 18 | 0.25 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 18 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 43 | 0.25 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 43 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 1 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 2 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 3 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 4 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 5 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 6 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 7 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 8 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 9 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 10 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 11 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 12 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 13 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 14 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 15 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 16 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 17 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 18 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 19 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 20 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 21 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 22 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 23 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 24 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 25 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 26 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 27 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 28 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 29 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 31 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 32 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 33 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 34 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 35 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 36 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 37 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 38 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 39 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 40 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 41 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 42 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 43 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 44 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 45 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 46 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 47 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 48 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 49 | 0.25 |
| (1,530) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HB3 | 50 | 0.25 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 1 | 0.25 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 24 | 0.25 |
| (1,518) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB3 | 17 | 0.25 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 14 | 0.25 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 22 | 0.25 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 48 | 0.25 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 49 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 1 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 2 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 3 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 4 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 5 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 6 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 7 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 8 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 9 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 10 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 11 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 12 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 13 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 14 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 15 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 16 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 17 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 18 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 19 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 20 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 21 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 22 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 23 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 24 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 25 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 26 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 27 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 28 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 29 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 30 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 31 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 32 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 33 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 34 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 35 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 36 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 37 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 38 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 39 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 40 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 41 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 42 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 43 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 44 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 45 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 46 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 47 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 48 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 49 | 0.25 |
| (1,515) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 50 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 1 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 2 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 3 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 4 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 5 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 6 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 7 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 8 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 9 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 10 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 11 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 12 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 13 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 14 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 15 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 16 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 17 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 18 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 19 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 20 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 21 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 22 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 23 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 24 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 25 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 26 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 27 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 28 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 29 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 30 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 31 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 32 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 33 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 34 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 35 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 36 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 37 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 38 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 39 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 40 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 41 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 42 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 43 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 44 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 45 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 46 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 47 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 48 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 49 | 0.25 |
| (1,502) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:HB3 | 50 | 0.25 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 7 | 0.25 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 16 | 0.25 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 17 | 0.25 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 21 | 0.25 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 37 | 0.25 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 38 | 0.25 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 42 | 0.25 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 23 | 0.25 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 42 | 0.25 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 42 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,283) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:11:GLU:HB2 | 9 | 0.25 |
| (1,283) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:11:GLU:HB2 | 41 | 0.25 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 46 | 0.25 |
| (1,262) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 23 | 0.25 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 23 | 0.25 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 15 | 0.25 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 15 | 0.25 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 15 | 0.25 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 15 | 0.25 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 16 | 0.25 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 16 | 0.25 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 16 | 0.25 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 19 | 0.25 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 19 | 0.25 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 19 | 0.25 |
| (1,230) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:25:GLN:HG3 | 30 | 0.25 |
| (1,230) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:25:GLN:HG3 | 44 | 0.25 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 9 | 0.25 |
| (1,196) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:HA | 40 | 0.25 |
| (1,189) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 1 | 0.25 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 12 | 0.25 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 12 | 0.25 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 12 | 0.25 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 44 | 0.25 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 44 | 0.25 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 44 | 0.25 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 35 | 0.25 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 42 | 0.25 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 49 | 0.25 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 40 | 0.25 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 40 | 0.25 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 40 | 0.25 |
| (1,169) | 1:A:3:PRO:HG2 | 1:A:3:PRO:HB3 | 6 | 0.25 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 37 | 0.25 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 48 | 0.25 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 49 | 0.25 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 7 | 0.25 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 24 | 0.25 |
| (1,132) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HB2 | 4 | 0.25 |
| (1,132) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HB2 | 13 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 2 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 2 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 2 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 2 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 9 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 9 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 9 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 9 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 13 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 13 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 13 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 13 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 21 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 21 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 21 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 21 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 22 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 22 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 22 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 22 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 26 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 26 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 26 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 26 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 33 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 33 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 33 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 33 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 36 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 36 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 36 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 36 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 37 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 37 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 37 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 37 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 38 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 38 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 38 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 38 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 40 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 40 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 40 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 40 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 42 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 42 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 42 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 42 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 45 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 45 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 45 | 0.25 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 45 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 2 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 3 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 4 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 6 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 8 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 9 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 10 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 11 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 12 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 14 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 16 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 18 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 20 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 25 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 27 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 28 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 29 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 30 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 32 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 38 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 40 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 41 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 42 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 44 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 45 | 0.25 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 48 | 0.25 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 7 | 0.25 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 7 | 0.25 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 7 | 0.25 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 7 | 0.25 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 7 | 0.25 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 7 | 0.25 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 21 | 0.25 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 21 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 21 | 0.25 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 21 | 0.25 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 21 | 0.25 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 21 | 0.25 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 6 | 0.25 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 6 | 0.25 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 14 | 0.25 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 14 | 0.25 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 16 | 0.25 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 16 | 0.25 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 4 | 0.25 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 4 | 0.25 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 5 | 0.25 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 5 | 0.25 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 7 | 0.25 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 7 | 0.25 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 11 | 0.25 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 11 | 0.25 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 17 | 0.25 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 17 | 0.25 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 24 | 0.25 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 24 | 0.25 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 32 | 0.25 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 32 | 0.25 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 35 | 0.25 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 35 | 0.25 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HG2 | 46 | 0.25 |
| (1,1036) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:HB3 | 46 | 0.25 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 12 | 0.25 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 12 | 0.25 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 23 | 0.25 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 23 | 0.25 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 30 | 0.25 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 30 | 0.25 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 11 | 0.25 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 11 | 0.25 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HB2 | 4 | 0.25 |
| (1,1019) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:3:PRO:HB2 | 4 | 0.25 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 40 | 0.25 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 40 | 0.25 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 40 | 0.25 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 40 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 46 | 0.25 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 46 | 0.25 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 46 | 0.25 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 46 | 0.25 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 12 | 0.25 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 12 | 0.25 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 49 | 0.25 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 49 | 0.25 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 41 | 0.24 |
| (2,932) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 40 | 0.24 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.24 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.24 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 43 | 0.24 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 3 | 0.24 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 10 | 0.24 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 13 | 0.24 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 21 | 0.24 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 25 | 0.24 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 33 | 0.24 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 42 | 0.24 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 13 | 0.24 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 28 | 0.24 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 45 | 0.24 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 12 | 0.24 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 12 | 0.24 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 18 | 0.24 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 18 | 0.24 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 39 | 0.24 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 39 | 0.24 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 10 | 0.24 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 35 | 0.24 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 22 | 0.24 |
| (2,838) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.24 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 38 | 0.24 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 50 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 1 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 2 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 3 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 4 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 5 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 6 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 7 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 8 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 9 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 10 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 11 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 12 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 13 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 14 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 15 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 16 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 17 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 18 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 19 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 20 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 21 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 22 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 24 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 25 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 26 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 27 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 28 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 29 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 30 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 31 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 32 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 33 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 35 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 36 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 37 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 39 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 41 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 42 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 43 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 44 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 45 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 46 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 49 | 0.24 |
| (2,834) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 50 | 0.24 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 37 | 0.24 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 37 | 0.24 |
| (2,831) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 37 | 0.24 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 42 | 0.24 |
| (2,799) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB2 | 11 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.24 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 13 | 0.24 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 15 | 0.24 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 17 | 0.24 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 27 | 0.24 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 29 | 0.24 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 34 | 0.24 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 3 | 0.24 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 8 | 0.24 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 11 | 0.24 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 19 | 0.24 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 33 | 0.24 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 35 | 0.24 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 1 | 0.24 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 8 | 0.24 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 11 | 0.24 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 12 | 0.24 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 26 | 0.24 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 49 | 0.24 |
| (2,734) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD21 | 42 | 0.24 |
| (2,734) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD22 | 42 | 0.24 |
| (2,734) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD23 | 42 | 0.24 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 1 | 0.24 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 33 | 0.24 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 33 | 0.24 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 44 | 0.24 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 44 | 0.24 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 9 | 0.24 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.24 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.24 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.24 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 37 | 0.24 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 37 | 0.24 |
| (2,69) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 37 | 0.24 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 9 | 0.24 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 9 | 0.24 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 9 | 0.24 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 44 | 0.24 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 44 | 0.24 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 44 | 0.24 |
| (2,682) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 38 | 0.24 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 30 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 31 | 0.24 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 29 | 0.24 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 8 | 0.24 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 22 | 0.24 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 50 | 0.24 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 10 | 0.24 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 10 | 0.24 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 11 | 0.24 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 11 | 0.24 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 14 | 0.24 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 14 | 0.24 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 46 | 0.24 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 46 | 0.24 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 35 | 0.24 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 12 | 0.24 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 12 | 0.24 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 12 | 0.24 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 7 | 0.24 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 11 | 0.24 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 13 | 0.24 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 21 | 0.24 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 32 | 0.24 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 36 | 0.24 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 39 | 0.24 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 45 | 0.24 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 50 | 0.24 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 0.24 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 0.24 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 0.24 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 0.24 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 0.24 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 0.24 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 35 | 0.24 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 35 | 0.24 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 35 | 0.24 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 0.24 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 0.24 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 0.24 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 0.24 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 0.24 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 0.24 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 0.24 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 0.24 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 25 | 0.24 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 28 | 0.24 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 30 | 0.24 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 41 | 0.24 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 46 | 0.24 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 5 | 0.24 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 41 | 0.24 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 41 | 0.24 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 43 | 0.24 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 43 | 0.24 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 3 | 0.24 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 10 | 0.24 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 13 | 0.24 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 21 | 0.24 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 25 | 0.24 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 33 | 0.24 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 42 | 0.24 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 1 | 0.24 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 5 | 0.24 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 8 | 0.24 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 17 | 0.24 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 25 | 0.24 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 29 | 0.24 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 37 | 0.24 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 46 | 0.24 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 38 | 0.24 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 38 | 0.24 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 38 | 0.24 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 5 | 0.24 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 5 | 0.24 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 5 | 0.24 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 12 | 0.24 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 12 | 0.24 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 12 | 0.24 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 39 | 0.24 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 47 | 0.24 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 42 | 0.24 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 22 | 0.24 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 22 | 0.24 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 31 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 31 | 0.24 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 41 | 0.24 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 41 | 0.24 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 48 | 0.24 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 48 | 0.24 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 50 | 0.24 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 50 | 0.24 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 3 | 0.24 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 3 | 0.24 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 18 | 0.24 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 18 | 0.24 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 19 | 0.24 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 19 | 0.24 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 15 | 0.24 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 7 | 0.24 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 16 | 0.24 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 23 | 0.24 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 30 | 0.24 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 30 | 0.24 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 30 | 0.24 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 30 | 0.24 |
| (2,501) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 30 | 0.24 |
| (2,501) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 30 | 0.24 |
| (2,50) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB2 | 11 | 0.24 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 39 | 0.24 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 47 | 0.24 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 33 | 0.24 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 33 | 0.24 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 44 | 0.24 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 44 | 0.24 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 3 | 0.24 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 3 | 0.24 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 18 | 0.24 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 18 | 0.24 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 19 | 0.24 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 19 | 0.24 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 15 | 0.24 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.24 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.24 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 43 | 0.24 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 50 | 0.24 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 7 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 16 | 0.24 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 23 | 0.24 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 30 | 0.24 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.24 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.24 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.24 |
| (2,433) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD21 | 42 | 0.24 |
| (2,433) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD22 | 42 | 0.24 |
| (2,433) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD23 | 42 | 0.24 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 35 | 0.24 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 0.24 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 0.24 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 0.24 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 0.24 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 0.24 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 0.24 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 35 | 0.24 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 35 | 0.24 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 35 | 0.24 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 0.24 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 0.24 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 0.24 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 0.24 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 0.24 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 0.24 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 0.24 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 0.24 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 0.24 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 30 | 0.24 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 30 | 0.24 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 30 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 1 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 2 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 3 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 4 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 5 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 6 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 7 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 8 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 9 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 10 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 11 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 12 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 13 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 14 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 15 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 16 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 17 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 18 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 19 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 20 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 21 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 22 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 24 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 25 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 26 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 27 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 28 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 29 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 30 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 31 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 32 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 33 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 35 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 36 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 37 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 39 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 41 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 42 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 43 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 44 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 45 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 46 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 49 | 0.24 |
| (2,413) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 50 | 0.24 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 10 | 0.24 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 10 | 0.24 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 11 | 0.24 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 11 | 0.24 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 14 | 0.24 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 14 | 0.24 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 46 | 0.24 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 46 | 0.24 |
| (2,349) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 30 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,349) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 30 | 0.24 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 9 | 0.24 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 9 | 0.24 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 9 | 0.24 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 44 | 0.24 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 44 | 0.24 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 44 | 0.24 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 13 | 0.24 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 28 | 0.24 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 45 | 0.24 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 22 | 0.24 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 35 | 0.24 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 38 | 0.24 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.24 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 13 | 0.24 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 15 | 0.24 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 17 | 0.24 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 27 | 0.24 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 29 | 0.24 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 34 | 0.24 |
| (2,317) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 38 | 0.24 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 10 | 0.24 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 12 | 0.24 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 12 | 0.24 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 18 | 0.24 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 18 | 0.24 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 39 | 0.24 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 39 | 0.24 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 7 | 0.24 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 11 | 0.24 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 13 | 0.24 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 21 | 0.24 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 32 | 0.24 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 36 | 0.24 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 39 | 0.24 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 45 | 0.24 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 50 | 0.24 |
| (2,251) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.24 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 41 | 0.24 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 41 | 0.24 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 43 | 0.24 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 43 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 1 | 0.24 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 5 | 0.24 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 8 | 0.24 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 17 | 0.24 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 25 | 0.24 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 29 | 0.24 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 37 | 0.24 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 46 | 0.24 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 1 | 0.24 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 30 | 0.24 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 31 | 0.24 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 29 | 0.24 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 8 | 0.24 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 22 | 0.24 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 50 | 0.24 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 9 | 0.24 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 41 | 0.24 |
| (2,159) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 40 | 0.24 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 5 | 0.24 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 3 | 0.24 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 8 | 0.24 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 11 | 0.24 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 19 | 0.24 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 33 | 0.24 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 35 | 0.24 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 25 | 0.24 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 28 | 0.24 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 30 | 0.24 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 41 | 0.24 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 46 | 0.24 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 1 | 0.24 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 8 | 0.24 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 11 | 0.24 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 12 | 0.24 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 26 | 0.24 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 49 | 0.24 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 22 | 0.24 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 22 | 0.24 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 31 | 0.24 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 31 | 0.24 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 41 | 0.24 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 41 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 48 | 0.24 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 48 | 0.24 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 50 | 0.24 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 50 | 0.24 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 12 | 0.24 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 12 | 0.24 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 13 | 0.24 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 13 | 0.24 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 41 | 0.24 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 41 | 0.24 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 48 | 0.24 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 48 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 1 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 1 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 2 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 2 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 3 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 3 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 4 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 4 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 5 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 5 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 6 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 6 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 7 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 7 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 9 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 9 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 11 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 11 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 13 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 13 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 15 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 15 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 16 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 16 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 17 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 17 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 19 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 19 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 20 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 20 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 21 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 21 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 23 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 23 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 24 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 24 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 26 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 26 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 28 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 28 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 29 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 29 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 31 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 31 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 33 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 33 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 34 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 34 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 35 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 35 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 36 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 36 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 37 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 37 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 41 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 41 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 42 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 42 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 45 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 45 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 46 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 46 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 47 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 47 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 48 | 0.24 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 48 | 0.24 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 41 | 0.24 |
| (1,906) | 1:A:11:GLU:HB3 | 1:A:12:GLN:H | 40 | 0.24 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.24 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.24 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 43 | 0.24 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 3 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 10 | 0.24 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 13 | 0.24 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 21 | 0.24 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 25 | 0.24 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 33 | 0.24 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 42 | 0.24 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 13 | 0.24 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 28 | 0.24 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 45 | 0.24 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 12 | 0.24 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 12 | 0.24 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 18 | 0.24 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 18 | 0.24 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 39 | 0.24 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 39 | 0.24 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 10 | 0.24 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 35 | 0.24 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 22 | 0.24 |
| (1,812) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.24 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 38 | 0.24 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 50 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 1 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 2 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 3 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 4 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 5 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 6 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 7 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 8 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 9 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 10 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 11 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 12 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 13 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 14 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 15 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 16 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 17 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 18 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 19 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 20 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 21 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 22 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 24 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 25 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 26 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 27 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 28 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 29 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 30 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 31 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 32 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 33 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 35 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 36 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 37 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 39 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 41 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 42 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 43 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 44 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 45 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 46 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 49 | 0.24 |
| (1,808) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 50 | 0.24 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HB2 | 37 | 0.24 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HB2 | 37 | 0.24 |
| (1,805) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 37 | 0.24 |
| (1,774) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB2 | 11 | 0.24 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.24 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 13 | 0.24 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 15 | 0.24 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 17 | 0.24 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 27 | 0.24 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 29 | 0.24 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 34 | 0.24 |
| (1,77) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:25:GLN:HA | 28 | 0.24 |
| (1,77) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:25:GLN:HA | 28 | 0.24 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 3 | 0.24 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 8 | 0.24 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 11 | 0.24 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 19 | 0.24 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 33 | 0.24 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 35 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 1 | 0.24 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 8 | 0.24 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 11 | 0.24 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 12 | 0.24 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 26 | 0.24 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 49 | 0.24 |
| (1,710) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD21 | 42 | 0.24 |
| (1,710) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD22 | 42 | 0.24 |
| (1,710) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD23 | 42 | 0.24 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 1 | 0.24 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 33 | 0.24 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 33 | 0.24 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 44 | 0.24 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 44 | 0.24 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 9 | 0.24 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.24 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.24 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.24 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 9 | 0.24 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 9 | 0.24 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 9 | 0.24 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 44 | 0.24 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 44 | 0.24 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 44 | 0.24 |
| (1,659) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 38 | 0.24 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 30 | 0.24 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 31 | 0.24 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 29 | 0.24 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 8 | 0.24 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 22 | 0.24 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 50 | 0.24 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 10 | 0.24 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 10 | 0.24 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 11 | 0.24 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 11 | 0.24 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 14 | 0.24 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 14 | 0.24 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 46 | 0.24 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 46 | 0.24 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 35 | 0.24 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 7 | 0.24 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 11 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 13 | 0.24 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 21 | 0.24 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 32 | 0.24 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 36 | 0.24 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 39 | 0.24 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 45 | 0.24 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 50 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 35 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 35 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 35 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 0.24 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 0.24 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 25 | 0.24 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 28 | 0.24 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 30 | 0.24 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 41 | 0.24 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 46 | 0.24 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 5 | 0.24 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 41 | 0.24 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 41 | 0.24 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 43 | 0.24 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 43 | 0.24 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 1 | 0.24 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 5 | 0.24 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 8 | 0.24 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 17 | 0.24 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 25 | 0.24 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 29 | 0.24 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 37 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 46 | 0.24 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 12 | 0.24 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 12 | 0.24 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 12 | 0.24 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 39 | 0.24 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 47 | 0.24 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 42 | 0.24 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 22 | 0.24 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 22 | 0.24 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 31 | 0.24 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 31 | 0.24 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 41 | 0.24 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 41 | 0.24 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 48 | 0.24 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 48 | 0.24 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 50 | 0.24 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 50 | 0.24 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 3 | 0.24 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 3 | 0.24 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 18 | 0.24 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 18 | 0.24 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 19 | 0.24 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 19 | 0.24 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 15 | 0.24 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 7 | 0.24 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 16 | 0.24 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 23 | 0.24 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 30 | 0.24 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 30 | 0.24 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 30 | 0.24 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 30 | 0.24 |
| (1,491) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 30 | 0.24 |
| (1,491) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 30 | 0.24 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 1 | 0.24 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 18 | 0.24 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 33 | 0.24 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 40 | 0.24 |
| (1,283) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:11:GLU:HB2 | 10 | 0.24 |
| (1,283) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:11:GLU:HB2 | 13 | 0.24 |
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 47 | 0.24 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 33 | 0.24 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 4 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 10 | 0.24 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 11 | 0.24 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 13 | 0.24 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 14 | 0.24 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 18 | 0.24 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 23 | 0.24 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 25 | 0.24 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 1 | 0.24 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 1 | 0.24 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 1 | 0.24 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 10 | 0.24 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 10 | 0.24 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 10 | 0.24 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 26 | 0.24 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 26 | 0.24 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 26 | 0.24 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 37 | 0.24 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 37 | 0.24 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 37 | 0.24 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 46 | 0.24 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 46 | 0.24 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 46 | 0.24 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 48 | 0.24 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 48 | 0.24 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 48 | 0.24 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 48 | 0.24 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 48 | 0.24 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 48 | 0.24 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:16:ASN:HB3 | 44 | 0.24 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:16:ASN:HB3 | 44 | 0.24 |
| (1,181) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:16:ASN:HB3 | 44 | 0.24 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:14:ASN:HB3 | 11 | 0.24 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:14:ASN:HB3 | 11 | 0.24 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:14:ASN:HB3 | 11 | 0.24 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 12 | 0.24 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 25 | 0.24 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 3 | 0.24 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 3 | 0.24 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 3 | 0.24 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 13 | 0.24 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 13 | 0.24 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 13 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 23 | 0.24 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 28 | 0.24 |
| (1,132) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HB2 | 32 | 0.24 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 17 | 0.24 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 14 | 0.24 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 14 | 0.24 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 14 | 0.24 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 14 | 0.24 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 14 | 0.24 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 14 | 0.24 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 28 | 0.24 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 28 | 0.24 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 28 | 0.24 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 28 | 0.24 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 28 | 0.24 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 28 | 0.24 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 21 | 0.24 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 21 | 0.24 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 38 | 0.24 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 38 | 0.24 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 40 | 0.24 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 40 | 0.24 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HG2 | 25 | 0.24 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HG2 | 25 | 0.24 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HG2 | 25 | 0.24 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.24 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.24 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 25 | 0.24 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 28 | 0.24 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 28 | 0.24 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 31 | 0.24 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 31 | 0.24 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:HA | 34 | 0.24 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:HA | 34 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 3 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 3 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 3 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 3 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 5 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 5 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 5 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 5 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 7 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 7 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 7 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 7 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 8 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 8 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 8 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 8 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 9 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 9 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 9 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 9 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 11 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 11 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 11 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 11 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 12 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 12 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 12 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 12 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 13 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 13 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 13 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 13 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 14 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 14 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 14 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 14 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 16 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 16 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 16 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 16 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 17 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 17 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 17 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 17 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 20 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 20 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 20 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 20 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 22 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 22 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 22 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 22 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 23 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 23 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 23 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 23 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 25 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 25 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 25 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 25 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 26 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 26 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 26 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 26 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 28 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 28 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 28 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 28 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 29 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 29 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 29 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 29 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 33 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 33 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 33 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 33 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 35 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 35 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 35 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 35 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 41 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 41 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 41 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 41 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 43 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 43 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 43 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 43 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 45 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 45 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 45 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 45 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 47 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 47 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 47 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 47 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 48 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 48 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 48 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 48 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 49 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 49 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 49 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 49 | 0.24 |
| (2,943) | 1:A:28:SER:HB3 | 1:A:28:SER:H | 17 | 0.23 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 12 | 0.23 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 19 | 0.23 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 14 | 0.23 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 41 | 0.23 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 32 | 0.23 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 40 | 0.23 |
| (2,904) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 27 | 0.23 |
| (2,904) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 32 | 0.23 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 8 | 0.23 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 10 | 0.23 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 44 | 0.23 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 9 | 0.23 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 12 | 0.23 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 48 | 0.23 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 43 | 0.23 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 43 | 0.23 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 43 | 0.23 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 44 | 0.23 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 44 | 0.23 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 44 | 0.23 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 49 | 0.23 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 49 | 0.23 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 49 | 0.23 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 24 | 0.23 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 2 | 0.23 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 9 | 0.23 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 10 | 0.23 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 16 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,842) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 39 | 0.23 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 26 | 0.23 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.23 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 7 | 0.23 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 15 | 0.23 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 24 | 0.23 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 32 | 0.23 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 42 | 0.23 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 49 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 1 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 2 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 3 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 4 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 5 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 6 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 7 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 8 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 9 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 10 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 11 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 12 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 13 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 14 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 15 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 16 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 17 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 18 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 19 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 20 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 21 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 22 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 23 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 24 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 25 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 26 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 27 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 28 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 29 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 30 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 31 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 32 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 33 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 34 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 35 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 36 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 37 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 38 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 39 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 40 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 41 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 42 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 43 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 44 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 45 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 46 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 47 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 48 | 0.23 |
| (2,835) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 49 | 0.23 |
| (2,824) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 38 | 0.23 |
| (2,818) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 37 | 0.23 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 18 | 0.23 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 2 | 0.23 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 10 | 0.23 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 22 | 0.23 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 25 | 0.23 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 48 | 0.23 |
| (2,794) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 4 | 0.23 |
| (2,794) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 26 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 1 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 2 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 4 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 5 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 6 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 7 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 9 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 10 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 12 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 13 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 14 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 15 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 16 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 17 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 18 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 20 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 21 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 22 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 23 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 24 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 25 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 26 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 27 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 28 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 29 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 30 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 31 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 32 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 34 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 36 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 37 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 38 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 39 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 40 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 41 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 42 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 43 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 44 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 45 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 46 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 47 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 48 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 49 | 0.23 |
| (2,782) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 50 | 0.23 |
| (2,781) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 3 | 0.23 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 14 | 0.23 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 25 | 0.23 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 33 | 0.23 |
| (2,734) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD21 | 4 | 0.23 |
| (2,734) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD22 | 4 | 0.23 |
| (2,734) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD23 | 4 | 0.23 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 31 | 0.23 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 32 | 0.23 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 1 | 0.23 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 1 | 0.23 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 29 | 0.23 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 31 | 0.23 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 14 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 32 | 0.23 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.23 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.23 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.23 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 43 | 0.23 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 43 | 0.23 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 43 | 0.23 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 32 | 0.23 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.23 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.23 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 7 | 0.23 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 7 | 0.23 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 7 | 0.23 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 50 | 0.23 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 50 | 0.23 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 50 | 0.23 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 43 | 0.23 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG21 | 1:A:12:GLN:HE22 | 36 | 0.23 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG22 | 1:A:12:GLN:HE22 | 36 | 0.23 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG23 | 1:A:12:GLN:HE22 | 36 | 0.23 |
| (2,667) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 38 | 0.23 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 15 | 0.23 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 19 | 0.23 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 14 | 0.23 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 14 | 0.23 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 14 | 0.23 |
| (2,655) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 4 | 0.23 |
| (2,655) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 29 | 0.23 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 27 | 0.23 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 27 | 0.23 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 33 | 0.23 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 33 | 0.23 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 38 | 0.23 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 38 | 0.23 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 1 | 0.23 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 21 | 0.23 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 34 | 0.23 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 28 | 0.23 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 31 | 0.23 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 32 | 0.23 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 32 | 0.23 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 32 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 32 | 0.23 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 3 | 0.23 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 12 | 0.23 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 26 | 0.23 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 28 | 0.23 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 35 | 0.23 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 43 | 0.23 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 44 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 1 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 1 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 1 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 2 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 2 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 2 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 3 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 3 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 3 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 6 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 6 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 6 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 7 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 7 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 7 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 8 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 8 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 8 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 9 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 9 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 9 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 10 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 10 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 10 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 11 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 11 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 11 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 12 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 12 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 12 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 13 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 13 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 13 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 14 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 14 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 14 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 15 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 15 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 15 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 16 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 16 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 16 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 17 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 17 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 17 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 18 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 18 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 18 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 19 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 19 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 19 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 20 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 20 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 20 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 21 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 21 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 21 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 22 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 22 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 22 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 23 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 23 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 23 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 24 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 24 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 24 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 25 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 25 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 25 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 26 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 26 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 26 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 27 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 27 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 27 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 28 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 28 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 28 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 29 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 29 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 29 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 30 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 30 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 30 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 31 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 31 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 31 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 32 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 32 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 32 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 33 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 33 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 33 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 34 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 34 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 34 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 36 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 36 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 36 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 37 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 37 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 37 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 38 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 38 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 38 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 40 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 40 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 40 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 41 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 41 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 41 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 43 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 43 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 43 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 44 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 44 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 44 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 45 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 45 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 45 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 46 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 46 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 46 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 47 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 47 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 47 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 48 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 48 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 48 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 50 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 50 | 0.23 |
| (2,624) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 50 | 0.23 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 2 | 0.23 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 3 | 0.23 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 7 | 0.23 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 14 | 0.23 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 17 | 0.23 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 23 | 0.23 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 6 | 0.23 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 26 | 0.23 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 44 | 0.23 |
| (2,595) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 24 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 3 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 6 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 11 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 14 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 16 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 18 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 20 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 21 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 22 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 23 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 24 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 26 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 27 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 28 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 31 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 35 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 38 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 39 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 40 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 44 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 45 | 0.23 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 50 | 0.23 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG11 | 44 | 0.23 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG12 | 44 | 0.23 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG13 | 44 | 0.23 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 44 | 0.23 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 44 | 0.23 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 44 | 0.23 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 44 | 0.23 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 44 | 0.23 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 44 | 0.23 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 18 | 0.23 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 18 | 0.23 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 18 | 0.23 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 50 | 0.23 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 50 | 0.23 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 50 | 0.23 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 32 | 0.23 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 32 | 0.23 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 32 | 0.23 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 7 | 0.23 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 13 | 0.23 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 18 | 0.23 |
| (2,554) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 10 | 0.23 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 18 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 8 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 8 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 11 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 11 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 12 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 12 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 16 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 16 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 23 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 23 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 26 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 26 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 37 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 37 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 45 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 45 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 46 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 46 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 47 | 0.23 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 47 | 0.23 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 43 | 0.23 |
| (2,537) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 2 | 0.23 |
| (2,537) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 39 | 0.23 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 26 | 0.23 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 26 | 0.23 |
| (2,529) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 18 | 0.23 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 4 | 0.23 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 25 | 0.23 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 45 | 0.23 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 25 | 0.23 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 25 | 0.23 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 25 | 0.23 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 30 | 0.23 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 30 | 0.23 |
| (2,492) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 43 | 0.23 |
| (2,492) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 43 | 0.23 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 8 | 0.23 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 10 | 0.23 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 1 | 0.23 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 1 | 0.23 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 14 | 0.23 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 41 | 0.23 |
| (2,461) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 4 | 0.23 |
| (2,461) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 26 | 0.23 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 26 | 0.23 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 26 | 0.23 |
| (2,457) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 18 | 0.23 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 32 | 0.23 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 40 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 1 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 2 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 3 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 4 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 5 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 6 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 7 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 8 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 9 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 10 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 11 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 12 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 13 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 14 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 15 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 16 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 17 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 18 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 19 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 20 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 21 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 22 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 23 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 24 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 25 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 26 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 27 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 28 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 29 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 30 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 31 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 32 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 33 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 34 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 35 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 36 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 37 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 38 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 39 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 40 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 41 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 42 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 43 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 44 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 45 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 46 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 47 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 48 | 0.23 |
| (2,448) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 49 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 1 | 0.23 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 21 | 0.23 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 34 | 0.23 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 4 | 0.23 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 25 | 0.23 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 45 | 0.23 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.23 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.23 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.23 |
| (2,433) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD21 | 4 | 0.23 |
| (2,433) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD22 | 4 | 0.23 |
| (2,433) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD23 | 4 | 0.23 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 28 | 0.23 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 31 | 0.23 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 32 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 1 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 1 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 1 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 2 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 2 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 2 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 3 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 3 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 3 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 6 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 6 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 6 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 7 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 7 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 7 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 8 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 8 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 8 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 9 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 9 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 9 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 10 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 10 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 10 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 11 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 11 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 11 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 12 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 12 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 12 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 13 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 13 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 13 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 14 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 14 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 14 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 15 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 15 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 15 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 16 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 16 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 16 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 17 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 17 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 17 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 18 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 18 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 18 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 19 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 19 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 19 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 20 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 20 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 20 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 21 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 21 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 21 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 22 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 22 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 22 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 23 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 23 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 23 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 24 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 24 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 24 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 25 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 25 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 25 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 26 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 26 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 26 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 27 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 27 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 27 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 28 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 28 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 28 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 29 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 29 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 29 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 30 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 30 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 30 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 31 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 31 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 31 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 32 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 32 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 32 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 33 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 33 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 33 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 34 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 34 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 34 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 36 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 36 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 36 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 37 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 37 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 37 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 38 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 38 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 38 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 40 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 40 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 40 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 41 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 41 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 41 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 43 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 43 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 43 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 44 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 44 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 44 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 45 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 45 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 45 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 46 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 46 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 46 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 47 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 47 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 47 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 48 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 48 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 48 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 50 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 50 | 0.23 |
| (2,425) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 50 | 0.23 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 25 | 0.23 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 25 | 0.23 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 25 | 0.23 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 29 | 0.23 |
| (2,4) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 38 | 0.23 |
| (2,392) | 1:A:28:SER:HB3 | 1:A:28:SER:H | 17 | 0.23 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 31 | 0.23 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 27 | 0.23 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 27 | 0.23 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 33 | 0.23 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 33 | 0.23 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 38 | 0.23 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 38 | 0.23 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG11 | 44 | 0.23 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG12 | 44 | 0.23 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG13 | 44 | 0.23 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 44 | 0.23 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 44 | 0.23 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 44 | 0.23 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 44 | 0.23 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 44 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 44 | 0.23 |
| (2,344) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 38 | 0.23 |
| (2,341) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 39 | 0.23 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 43 | 0.23 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 43 | 0.23 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 43 | 0.23 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 9 | 0.23 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 12 | 0.23 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 48 | 0.23 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 2 | 0.23 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 9 | 0.23 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 10 | 0.23 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 16 | 0.23 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 24 | 0.23 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.23 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 7 | 0.23 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 15 | 0.23 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 24 | 0.23 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 32 | 0.23 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 42 | 0.23 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 49 | 0.23 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 2 | 0.23 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 10 | 0.23 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 22 | 0.23 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 25 | 0.23 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 48 | 0.23 |
| (2,3) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 37 | 0.23 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 2 | 0.23 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 3 | 0.23 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 3 | 0.23 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 12 | 0.23 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 26 | 0.23 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 28 | 0.23 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 35 | 0.23 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 43 | 0.23 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 44 | 0.23 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 43 | 0.23 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 43 | 0.23 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 43 | 0.23 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 44 | 0.23 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 44 | 0.23 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 44 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 49 | 0.23 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 49 | 0.23 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 49 | 0.23 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 7 | 0.23 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 13 | 0.23 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 18 | 0.23 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 26 | 0.23 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 43 | 0.23 |
| (2,226) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 2 | 0.23 |
| (2,226) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 39 | 0.23 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 43 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 3 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 6 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 11 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 14 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 16 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 18 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 20 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 21 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 22 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 23 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 24 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 26 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 27 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 28 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 31 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 35 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 38 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 39 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 40 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 44 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 45 | 0.23 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 50 | 0.23 |
| (2,2) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 24 | 0.23 |
| (2,198) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 4 | 0.23 |
| (2,198) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 29 | 0.23 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 31 | 0.23 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 32 | 0.23 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 32 | 0.23 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 15 | 0.23 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 19 | 0.23 |
| (2,168) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 27 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,168) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 32 | 0.23 |
| (2,165) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 3 | 0.23 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 14 | 0.23 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 32 | 0.23 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 12 | 0.23 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 19 | 0.23 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 6 | 0.23 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 26 | 0.23 |
| (2,147) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 43 | 0.23 |
| (2,147) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 43 | 0.23 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 30 | 0.23 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 30 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 1 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 2 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 4 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 5 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 6 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 7 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 9 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 10 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 12 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 13 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 14 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 15 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 16 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 17 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 18 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 20 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 21 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 22 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 23 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 24 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 25 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 26 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 27 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 28 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 29 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 30 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 31 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 32 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 34 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 36 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 37 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 38 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 39 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 40 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 41 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 42 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 43 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 44 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 45 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 46 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 47 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 48 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 49 | 0.23 |
| (2,137) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 50 | 0.23 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 7 | 0.23 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 14 | 0.23 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 17 | 0.23 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 23 | 0.23 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 14 | 0.23 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 25 | 0.23 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 33 | 0.23 |
| (2,102) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 10 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 8 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 8 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 11 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 11 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 12 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 12 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 16 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 16 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 23 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 23 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 26 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 26 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 37 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 37 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 45 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 45 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 46 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 46 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 47 | 0.23 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 47 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,998) | 1:A:15:VAL:HG21 | 1:A:22:GLN:HE21 | 40 | 0.23 |
| (1,998) | 1:A:15:VAL:HG22 | 1:A:22:GLN:HE21 | 40 | 0.23 |
| (1,998) | 1:A:15:VAL:HG23 | 1:A:22:GLN:HE21 | 40 | 0.23 |
| (1,998) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:22:GLN:HE21 | 40 | 0.23 |
| (1,998) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:22:GLN:HE21 | 40 | 0.23 |
| (1,998) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:22:GLN:HE21 | 40 | 0.23 |
| (1,998) | 1:A:15:VAL:HG21 | 1:A:22:GLN:H | 40 | 0.23 |
| (1,998) | 1:A:15:VAL:HG22 | 1:A:22:GLN:H | 40 | 0.23 |
| (1,998) | 1:A:15:VAL:HG23 | 1:A:22:GLN:H | 40 | 0.23 |
| (1,998) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:22:GLN:H | 40 | 0.23 |
| (1,998) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:22:GLN:H | 40 | 0.23 |
| (1,998) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:22:GLN:H | 40 | 0.23 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 5 | 0.23 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 5 | 0.23 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 28 | 0.23 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 28 | 0.23 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 37 | 0.23 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 37 | 0.23 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 47 | 0.23 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 47 | 0.23 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 49 | 0.23 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 49 | 0.23 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 50 | 0.23 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 50 | 0.23 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 39 | 0.23 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 39 | 0.23 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 27 | 0.23 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 27 | 0.23 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG3 | 40 | 0.23 |
| (1,991) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:19:PRO:HG2 | 40 | 0.23 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 11 | 0.23 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 11 | 0.23 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 26 | 0.23 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 26 | 0.23 |
| (1,917) | 1:A:28:SER:HB3 | 1:A:28:SER:H | 17 | 0.23 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 12 | 0.23 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 19 | 0.23 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 14 | 0.23 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 41 | 0.23 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 13 | 0.23 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 32 | 0.23 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 40 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,878) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 27 | 0.23 |
| (1,878) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 32 | 0.23 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 8 | 0.23 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 10 | 0.23 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 44 | 0.23 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 9 | 0.23 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 12 | 0.23 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 48 | 0.23 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 43 | 0.23 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 43 | 0.23 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 43 | 0.23 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 44 | 0.23 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 44 | 0.23 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 44 | 0.23 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 49 | 0.23 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 49 | 0.23 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 49 | 0.23 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 24 | 0.23 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 2 | 0.23 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 9 | 0.23 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 10 | 0.23 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 16 | 0.23 |
| (1,82) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB3 | 5 | 0.23 |
| (1,82) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB3 | 5 | 0.23 |
| (1,816) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 39 | 0.23 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 26 | 0.23 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.23 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 7 | 0.23 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 15 | 0.23 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 24 | 0.23 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 32 | 0.23 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 42 | 0.23 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 49 | 0.23 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 1 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 2 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 3 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 4 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 5 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 6 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 7 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 8 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 9 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 10 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 11 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 12 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 13 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 14 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 15 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 16 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 17 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 18 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 19 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 20 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 21 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 22 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 23 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 24 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 25 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 26 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 27 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 28 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 29 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 30 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 31 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 32 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 33 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 34 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 35 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 36 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 37 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 38 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 39 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 40 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 41 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 42 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 43 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 44 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 45 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 46 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 47 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 48 | 0.23 |
| (1,809) | 1:A:31:GLU:HB2 | 1:A:31:GLU:HB3 | 49 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,798) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:H | 38 | 0.23 |
| (1,792) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 37 | 0.23 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 2 | 0.23 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 10 | 0.23 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 22 | 0.23 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 25 | 0.23 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 48 | 0.23 |
| (1,769) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 4 | 0.23 |
| (1,769) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 26 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 1 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 2 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 4 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 5 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 6 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 7 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 9 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 10 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 12 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 13 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 14 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 15 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 16 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 17 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 18 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 20 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 21 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 22 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 23 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 24 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 25 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 26 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 27 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 28 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 29 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 30 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 31 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 32 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 34 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 36 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 37 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 38 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 39 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 40 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 41 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 42 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 43 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 44 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 45 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 46 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 47 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 48 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 49 | 0.23 |
| (1,757) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:HB3 | 50 | 0.23 |
| (1,756) | 1:A:12:GLN:HB3 | 1:A:12:GLN:HE21 | 3 | 0.23 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 14 | 0.23 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 25 | 0.23 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 33 | 0.23 |
| (1,710) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD21 | 4 | 0.23 |
| (1,710) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD22 | 4 | 0.23 |
| (1,710) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD23 | 4 | 0.23 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 31 | 0.23 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 32 | 0.23 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 1 | 0.23 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 1 | 0.23 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 29 | 0.23 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 31 | 0.23 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 14 | 0.23 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 32 | 0.23 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 43 | 0.23 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 43 | 0.23 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 43 | 0.23 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 32 | 0.23 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 43 | 0.23 |
| (1,647) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 38 | 0.23 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 15 | 0.23 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 19 | 0.23 |
| (1,636) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 4 | 0.23 |
| (1,636) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 29 | 0.23 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 27 | 0.23 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 27 | 0.23 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 33 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 33 | 0.23 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 38 | 0.23 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 38 | 0.23 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 1 | 0.23 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 21 | 0.23 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 34 | 0.23 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 28 | 0.23 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 31 | 0.23 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 32 | 0.23 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 3 | 0.23 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 12 | 0.23 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 26 | 0.23 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 28 | 0.23 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 35 | 0.23 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 43 | 0.23 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 44 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 1 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 1 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 1 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 2 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 2 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 2 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 3 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 3 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 3 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 6 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 6 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 6 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 7 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 7 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 7 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 8 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 8 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 8 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 9 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 9 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 9 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 10 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 10 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 10 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 11 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 11 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 11 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 12 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 12 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 12 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 13 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 13 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 13 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 14 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 14 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 14 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 15 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 15 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 15 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 16 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 16 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 16 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 17 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 17 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 17 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 18 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 18 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 18 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 19 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 19 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 19 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 20 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 20 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 20 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 21 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 21 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 21 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 22 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 22 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 22 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 23 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 23 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 23 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 24 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 24 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 24 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 25 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 25 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 25 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 26 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 26 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 26 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 27 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 27 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 27 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 28 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 28 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 28 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 29 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 29 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 29 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 30 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 30 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 30 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 31 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 31 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 31 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 32 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 32 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 32 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 33 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 33 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 33 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 34 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 34 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 34 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 36 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 36 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 36 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 37 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 37 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 37 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 38 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 38 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 38 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 40 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 40 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 40 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 41 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 41 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 41 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 43 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 43 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 43 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 44 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 44 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 44 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 45 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 45 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 45 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 46 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 46 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 46 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 47 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 47 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 47 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 48 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 48 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 48 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD11 | 50 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD12 | 50 | 0.23 |
| (1,607) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD13 | 50 | 0.23 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 2 | 0.23 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 3 | 0.23 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 7 | 0.23 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 14 | 0.23 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 17 | 0.23 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 23 | 0.23 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 6 | 0.23 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 26 | 0.23 |
| (1,578) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 24 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 3 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 6 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 11 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 14 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 16 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 18 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 20 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 21 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 22 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 23 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 24 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 26 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 27 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 28 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 31 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 35 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 38 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 39 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 40 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 44 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 45 | 0.23 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 50 | 0.23 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG11 | 44 | 0.23 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG12 | 44 | 0.23 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG13 | 44 | 0.23 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 44 | 0.23 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 44 | 0.23 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 44 | 0.23 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 44 | 0.23 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 44 | 0.23 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 44 | 0.23 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 50 | 0.23 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 50 | 0.23 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 50 | 0.23 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 32 | 0.23 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 32 | 0.23 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 32 | 0.23 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 7 | 0.23 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 13 | 0.23 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 18 | 0.23 |
| (1,544) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 10 | 0.23 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 18 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 8 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 8 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 11 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 11 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 12 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 12 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 16 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 16 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 23 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 23 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 26 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 26 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 37 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 37 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 45 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 45 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 46 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 46 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 47 | 0.23 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 47 | 0.23 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 43 | 0.23 |
| (1,527) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 2 | 0.23 |
| (1,527) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 39 | 0.23 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 26 | 0.23 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 26 | 0.23 |
| (1,519) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HA | 18 | 0.23 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 4 | 0.23 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 25 | 0.23 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 45 | 0.23 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 25 | 0.23 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 25 | 0.23 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 25 | 0.23 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 30 | 0.23 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 30 | 0.23 |
| (1,482) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 43 | 0.23 |
| (1,482) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 43 | 0.23 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 22 | 0.23 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 23 | 0.23 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 25 | 0.23 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 26 | 0.23 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 44 | 0.23 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 50 | 0.23 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 40 | 0.23 |
| (1,305) | 1:A:17:LYS:H | 1:A:14:ASN:HA | 28 | 0.23 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 2 | 0.23 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 42 | 0.23 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 46 | 0.23 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 48 | 0.23 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 2 | 0.23 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 2 | 0.23 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 2 | 0.23 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 33 | 0.23 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 33 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 33 | 0.23 |
| (1,230) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:25:GLN:HG3 | 11 | 0.23 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:14:ASN:HB3 | 47 | 0.23 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:14:ASN:HB3 | 47 | 0.23 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:14:ASN:HB3 | 47 | 0.23 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 8 | 0.23 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 8 | 0.23 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 8 | 0.23 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 16 | 0.23 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 16 | 0.23 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 16 | 0.23 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 35 | 0.23 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 35 | 0.23 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 35 | 0.23 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 43 | 0.23 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 43 | 0.23 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 43 | 0.23 |
| (1,132) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HB2 | 15 | 0.23 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 25 | 0.23 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 42 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 1 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 1 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 1 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 1 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 3 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 3 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 3 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 3 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 4 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 4 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 4 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 4 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 7 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 7 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 8 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 8 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 8 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 8 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 14 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 14 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 14 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 14 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 15 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 15 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 15 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 15 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 23 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 23 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 23 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 23 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 24 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 24 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 24 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 24 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 29 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 29 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 29 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 29 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 32 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 32 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 32 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 32 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 46 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 46 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 46 | 0.23 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 46 | 0.23 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 15 | 0.23 |
| (1,104) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB3 | 47 | 0.23 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 22 | 0.23 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 22 | 0.23 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 22 | 0.23 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 22 | 0.23 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 22 | 0.23 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 22 | 0.23 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 36 | 0.23 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 36 | 0.23 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 39 | 0.23 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 39 | 0.23 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 8 | 0.23 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 8 | 0.23 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 19 | 0.23 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 19 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 24 | 0.23 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 24 | 0.23 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 29 | 0.23 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 29 | 0.23 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 35 | 0.23 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 35 | 0.23 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HG2 | 6 | 0.23 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HG2 | 6 | 0.23 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HG2 | 6 | 0.23 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.23 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.23 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.23 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 3 | 0.23 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 3 | 0.23 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 7 | 0.23 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 7 | 0.23 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 19 | 0.23 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 19 | 0.23 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:HA | 32 | 0.23 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:HA | 32 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 2 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 2 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 2 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 2 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 4 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 4 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 4 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 4 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 21 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 21 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 21 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 21 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 32 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 32 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 32 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 32 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 36 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 36 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 36 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 36 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 37 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 37 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 37 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 37 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG3 | 50 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB3 | 1:A:5:GLN:HG2 | 50 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG3 | 50 | 0.23 |
| (1,1012) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:HG2 | 50 | 0.23 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 3 | 0.23 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 3 | 0.23 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 10 | 0.23 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 10 | 0.23 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 21 | 0.23 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 21 | 0.23 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 31 | 0.23 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 31 | 0.23 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 1 | 0.22 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 42 | 0.22 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 16 | 0.22 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 16 | 0.22 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 16 | 0.22 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 49 | 0.22 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 49 | 0.22 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 16 | 0.22 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 23 | 0.22 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 39 | 0.22 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.22 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 44 | 0.22 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.22 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 34 | 0.22 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 3 | 0.22 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 8 | 0.22 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 17 | 0.22 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 31 | 0.22 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 31 | 0.22 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 31 | 0.22 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 11 | 0.22 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 15 | 0.22 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 17 | 0.22 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 36 | 0.22 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 43 | 0.22 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 49 | 0.22 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 49 | 0.22 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 49 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,845) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:16:ASN:H | 44 | 0.22 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 1 | 0.22 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 2 | 0.22 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 3 | 0.22 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 4 | 0.22 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 8 | 0.22 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 14 | 0.22 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 16 | 0.22 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 17 | 0.22 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 22 | 0.22 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 25 | 0.22 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 29 | 0.22 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 34 | 0.22 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 35 | 0.22 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 36 | 0.22 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 45 | 0.22 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 48 | 0.22 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 12 | 0.22 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 37 | 0.22 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 23 | 0.22 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 44 | 0.22 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 45 | 0.22 |
| (2,794) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 9 | 0.22 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 25 | 0.22 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 4 | 0.22 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 23 | 0.22 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 23 | 0.22 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 30 | 0.22 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 30 | 0.22 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 44 | 0.22 |
| (2,734) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD21 | 49 | 0.22 |
| (2,734) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD22 | 49 | 0.22 |
| (2,734) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD23 | 49 | 0.22 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 27 | 0.22 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 13 | 0.22 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 13 | 0.22 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 21 | 0.22 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 21 | 0.22 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 28 | 0.22 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 28 | 0.22 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 8 | 0.22 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 26 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 45 | 0.22 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 29 | 0.22 |
| (2,705) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 29 | 0.22 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 31 | 0.22 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 34 | 0.22 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 24 | 0.22 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 24 | 0.22 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 24 | 0.22 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 4 | 0.22 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 44 | 0.22 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 47 | 0.22 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 3 | 0.22 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 11 | 0.22 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.22 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.22 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.22 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 4 | 0.22 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 4 | 0.22 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 4 | 0.22 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 47 | 0.22 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 47 | 0.22 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 47 | 0.22 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG21 | 1:A:12:GLN:HE22 | 30 | 0.22 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG22 | 1:A:12:GLN:HE22 | 30 | 0.22 |
| (2,668) | 1:A:15:VAL:HG23 | 1:A:12:GLN:HE22 | 30 | 0.22 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 5 | 0.22 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 45 | 0.22 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 19 | 0.22 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 19 | 0.22 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 25 | 0.22 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 25 | 0.22 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 8 | 0.22 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 11 | 0.22 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 13 | 0.22 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 25 | 0.22 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 41 | 0.22 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 20 | 0.22 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 42 | 0.22 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 46 | 0.22 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 10 | 0.22 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 35 | 0.22 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 9 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 5 | 0.22 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 27 | 0.22 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 29 | 0.22 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 32 | 0.22 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 37 | 0.22 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 49 | 0.22 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 34 | 0.22 |
| (2,595) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 7 | 0.22 |
| (2,595) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 27 | 0.22 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 2 | 0.22 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 4 | 0.22 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 9 | 0.22 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 12 | 0.22 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 13 | 0.22 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 30 | 0.22 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 33 | 0.22 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 36 | 0.22 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 41 | 0.22 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 42 | 0.22 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 43 | 0.22 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 48 | 0.22 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 49 | 0.22 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 3 | 0.22 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 3 | 0.22 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 3 | 0.22 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 4 | 0.22 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 4 | 0.22 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 4 | 0.22 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 4 | 0.22 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 4 | 0.22 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 4 | 0.22 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 47 | 0.22 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 47 | 0.22 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 47 | 0.22 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 5 | 0.22 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 37 | 0.22 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 25 | 0.22 |
| (2,555) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 24 | 0.22 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 12 | 0.22 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 37 | 0.22 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 2 | 0.22 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 2 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 19 | 0.22 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 19 | 0.22 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 29 | 0.22 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 29 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 24 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 24 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 24 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 24 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 24 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 24 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 24 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 24 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 24 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 37 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 37 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 37 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 37 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 37 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 37 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 37 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 37 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 37 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 40 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 40 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 40 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 40 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 40 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 40 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 40 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 40 | 0.22 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 40 | 0.22 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 4 | 0.22 |
| (2,537) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 14 | 0.22 |
| (2,537) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 43 | 0.22 |
| (2,537) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 46 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 21 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 21 | 0.22 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 21 | 0.22 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 18 | 0.22 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 18 | 0.22 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 18 | 0.22 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 45 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 45 | 0.22 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 45 | 0.22 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 31 | 0.22 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 31 | 0.22 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 25 | 0.22 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 13 | 0.22 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 13 | 0.22 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 21 | 0.22 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 21 | 0.22 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 28 | 0.22 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 28 | 0.22 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 16 | 0.22 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 23 | 0.22 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 39 | 0.22 |
| (2,461) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 9 | 0.22 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.22 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 44 | 0.22 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.22 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 8 | 0.22 |
| (2,433) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD21 | 49 | 0.22 |
| (2,433) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD22 | 49 | 0.22 |
| (2,433) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD23 | 49 | 0.22 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 11 | 0.22 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 13 | 0.22 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 25 | 0.22 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 41 | 0.22 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 21 | 0.22 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 21 | 0.22 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 21 | 0.22 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 18 | 0.22 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 18 | 0.22 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 18 | 0.22 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 45 | 0.22 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 45 | 0.22 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 45 | 0.22 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 4 | 0.22 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 44 | 0.22 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 47 | 0.22 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 8 | 0.22 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 26 | 0.22 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 45 | 0.22 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 19 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 19 | 0.22 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 25 | 0.22 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 25 | 0.22 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 23 | 0.22 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 23 | 0.22 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 30 | 0.22 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 30 | 0.22 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 24 | 0.22 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 24 | 0.22 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 24 | 0.22 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 3 | 0.22 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 8 | 0.22 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 17 | 0.22 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 11 | 0.22 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 15 | 0.22 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 17 | 0.22 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 36 | 0.22 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 43 | 0.22 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 49 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 1 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 2 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 3 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 4 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 8 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 14 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 16 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 17 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 22 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 25 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 29 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 34 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 35 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 36 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 45 | 0.22 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 48 | 0.22 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 23 | 0.22 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 44 | 0.22 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 45 | 0.22 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 9 | 0.22 |
| (2,286) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 24 | 0.22 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 20 | 0.22 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 42 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 46 | 0.22 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 29 | 0.22 |
| (2,27) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 29 | 0.22 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 25 | 0.22 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 31 | 0.22 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 31 | 0.22 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 31 | 0.22 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 5 | 0.22 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 37 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 24 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 24 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 24 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 24 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 24 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 24 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 24 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 24 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 24 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 37 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 37 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 37 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 37 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 37 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 37 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 37 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 37 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 37 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 40 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 40 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 40 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 40 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 40 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 40 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 40 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 40 | 0.22 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 40 | 0.22 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 4 | 0.22 |
| (2,226) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 14 | 0.22 |
| (2,226) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 43 | 0.22 |
| (2,226) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 46 | 0.22 |
| (2,222) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:16:ASN:H | 44 | 0.22 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 2 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 4 | 0.22 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 9 | 0.22 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 12 | 0.22 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 13 | 0.22 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 30 | 0.22 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 33 | 0.22 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 36 | 0.22 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 41 | 0.22 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 42 | 0.22 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 43 | 0.22 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 48 | 0.22 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 49 | 0.22 |
| (2,2) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 7 | 0.22 |
| (2,2) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 27 | 0.22 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 27 | 0.22 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 3 | 0.22 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 11 | 0.22 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 5 | 0.22 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 45 | 0.22 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 31 | 0.22 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 34 | 0.22 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 1 | 0.22 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 42 | 0.22 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 44 | 0.22 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 31 | 0.22 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 31 | 0.22 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 10 | 0.22 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 35 | 0.22 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 5 | 0.22 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 27 | 0.22 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 29 | 0.22 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 32 | 0.22 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 37 | 0.22 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 49 | 0.22 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 16 | 0.22 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 16 | 0.22 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 16 | 0.22 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 4 | 0.22 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 2 | 0.22 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 2 | 0.22 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 19 | 0.22 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 19 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 29 | 0.22 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 29 | 0.22 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 1 | 0.22 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 1 | 0.22 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 17 | 0.22 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 17 | 0.22 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 22 | 0.22 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 22 | 0.22 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 40 | 0.22 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 40 | 0.22 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 23 | 0.22 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 23 | 0.22 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 11 | 0.22 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 11 | 0.22 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 13 | 0.22 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 13 | 0.22 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 19 | 0.22 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 19 | 0.22 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 28 | 0.22 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 28 | 0.22 |
| (1,922) | 1:A:4:GLN:HA | 1:A:4:GLN:HG2 | 4 | 0.22 |
| (1,922) | 1:A:4:GLN:HA | 1:A:4:GLN:HG3 | 4 | 0.22 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 1 | 0.22 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 42 | 0.22 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 16 | 0.22 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 16 | 0.22 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 16 | 0.22 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 49 | 0.22 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 49 | 0.22 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 16 | 0.22 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 23 | 0.22 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 39 | 0.22 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.22 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 44 | 0.22 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 46 | 0.22 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 34 | 0.22 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 3 | 0.22 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 8 | 0.22 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 17 | 0.22 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 31 | 0.22 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 31 | 0.22 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 31 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 11 | 0.22 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 15 | 0.22 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 17 | 0.22 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 36 | 0.22 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 43 | 0.22 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 49 | 0.22 |
| (1,82) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB3 | 45 | 0.22 |
| (1,82) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB3 | 45 | 0.22 |
| (1,819) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:16:ASN:H | 44 | 0.22 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 1 | 0.22 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 2 | 0.22 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 3 | 0.22 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 4 | 0.22 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 8 | 0.22 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 14 | 0.22 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 16 | 0.22 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 17 | 0.22 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 22 | 0.22 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 25 | 0.22 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 29 | 0.22 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 34 | 0.22 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 35 | 0.22 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 36 | 0.22 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 45 | 0.22 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 48 | 0.22 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 23 | 0.22 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 44 | 0.22 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 45 | 0.22 |
| (1,769) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 9 | 0.22 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 25 | 0.22 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 4 | 0.22 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 23 | 0.22 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 23 | 0.22 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 30 | 0.22 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 30 | 0.22 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 44 | 0.22 |
| (1,710) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD21 | 49 | 0.22 |
| (1,710) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD22 | 49 | 0.22 |
| (1,710) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD23 | 49 | 0.22 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 27 | 0.22 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 13 | 0.22 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 13 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 21 | 0.22 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 21 | 0.22 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 28 | 0.22 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 28 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 8 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 26 | 0.22 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 45 | 0.22 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:H | 29 | 0.22 |
| (1,681) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:H | 29 | 0.22 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 31 | 0.22 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 34 | 0.22 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 24 | 0.22 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 24 | 0.22 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 24 | 0.22 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 4 | 0.22 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 44 | 0.22 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 47 | 0.22 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 3 | 0.22 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 11 | 0.22 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 5 | 0.22 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 45 | 0.22 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 19 | 0.22 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 19 | 0.22 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 25 | 0.22 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 25 | 0.22 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 8 | 0.22 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 11 | 0.22 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 13 | 0.22 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 25 | 0.22 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 41 | 0.22 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 20 | 0.22 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 42 | 0.22 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 46 | 0.22 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 10 | 0.22 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 35 | 0.22 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 9 | 0.22 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 5 | 0.22 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 27 | 0.22 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 29 | 0.22 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 32 | 0.22 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 37 | 0.22 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 49 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,578) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 7 | 0.22 |
| (1,578) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 27 | 0.22 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 2 | 0.22 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 4 | 0.22 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 9 | 0.22 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 12 | 0.22 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 13 | 0.22 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 30 | 0.22 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 33 | 0.22 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 36 | 0.22 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 41 | 0.22 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 42 | 0.22 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 43 | 0.22 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 48 | 0.22 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 49 | 0.22 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 4 | 0.22 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 4 | 0.22 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 4 | 0.22 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 47 | 0.22 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 47 | 0.22 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 47 | 0.22 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 5 | 0.22 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 37 | 0.22 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 25 | 0.22 |
| (1,545) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 24 | 0.22 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 12 | 0.22 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 37 | 0.22 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 2 | 0.22 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 2 | 0.22 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 19 | 0.22 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 19 | 0.22 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 29 | 0.22 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 29 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 24 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 24 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 24 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 24 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 24 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 24 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 24 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 24 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 24 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 37 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 37 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 37 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 37 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 37 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 37 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 37 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 37 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 37 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 40 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 40 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 40 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 40 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 40 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 40 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 40 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 40 | 0.22 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 40 | 0.22 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 4 | 0.22 |
| (1,527) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 14 | 0.22 |
| (1,527) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 43 | 0.22 |
| (1,527) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 46 | 0.22 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 21 | 0.22 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 21 | 0.22 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 21 | 0.22 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 18 | 0.22 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 18 | 0.22 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 18 | 0.22 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 45 | 0.22 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 45 | 0.22 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 45 | 0.22 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 31 | 0.22 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 31 | 0.22 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 9 | 0.22 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 13 | 0.22 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 24 | 0.22 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 29 | 0.22 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 5 | 0.22 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 44 | 0.22 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 21 | 0.22 |
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 7 | 0.22 |
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 33 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 45 | 0.22 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 28 | 0.22 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 26 | 0.22 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 38 | 0.22 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 45 | 0.22 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 45 | 0.22 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 45 | 0.22 |
| (1,196) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:HA | 12 | 0.22 |
| (1,196) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:HA | 14 | 0.22 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 1 | 0.22 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 1 | 0.22 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 1 | 0.22 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 8 | 0.22 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 8 | 0.22 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 8 | 0.22 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 24 | 0.22 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 24 | 0.22 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 24 | 0.22 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 17 | 0.22 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 20 | 0.22 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 48 | 0.22 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 5 | 0.22 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 18 | 0.22 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 18 | 0.22 |
| (1,138) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 18 | 0.22 |
| (1,134) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD3 | 37 | 0.22 |
| (1,132) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HB2 | 45 | 0.22 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 9 | 0.22 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 29 | 0.22 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 29 | 0.22 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 29 | 0.22 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 29 | 0.22 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 29 | 0.22 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 29 | 0.22 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 24 | 0.22 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 24 | 0.22 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 24 | 0.22 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 24 | 0.22 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 24 | 0.22 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 24 | 0.22 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 33 | 0.22 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 33 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 33 | 0.22 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 33 | 0.22 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 33 | 0.22 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 33 | 0.22 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 2 | 0.22 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 2 | 0.22 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 4 | 0.22 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 4 | 0.22 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 15 | 0.22 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 15 | 0.22 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 43 | 0.22 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 43 | 0.22 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 48 | 0.22 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 48 | 0.22 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 22 | 0.22 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 22 | 0.22 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 50 | 0.22 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 50 | 0.22 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 36 | 0.22 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 36 | 0.22 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 49 | 0.22 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 49 | 0.22 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 4 | 0.22 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 4 | 0.22 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 5 | 0.22 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 5 | 0.22 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 24 | 0.22 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 24 | 0.22 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 25 | 0.22 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 25 | 0.22 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 30 | 0.22 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 30 | 0.22 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 9 | 0.21 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 15 | 0.21 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 11 | 0.21 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.21 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 37 | 0.21 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 39 | 0.21 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 2 | 0.21 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 6 | 0.21 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 11 | 0.21 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 23 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 27 | 0.21 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 44 | 0.21 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 46 | 0.21 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 7 | 0.21 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 8 | 0.21 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 19 | 0.21 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 24 | 0.21 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 44 | 0.21 |
| (2,847) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 25 | 0.21 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 14 | 0.21 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 11 | 0.21 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 5 | 0.21 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 9 | 0.21 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 10 | 0.21 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 11 | 0.21 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 12 | 0.21 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 13 | 0.21 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 18 | 0.21 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 23 | 0.21 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 27 | 0.21 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 28 | 0.21 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 30 | 0.21 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 41 | 0.21 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 43 | 0.21 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 44 | 0.21 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 46 | 0.21 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 50 | 0.21 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 2 | 0.21 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 33 | 0.21 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 35 | 0.21 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 3 | 0.21 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 5 | 0.21 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 9 | 0.21 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 11 | 0.21 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 19 | 0.21 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 20 | 0.21 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 28 | 0.21 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 31 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 1 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 2 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 3 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 4 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 5 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 6 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 7 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 8 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 9 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 10 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 11 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 12 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 13 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 14 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 15 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 16 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 17 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 18 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 19 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 20 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 21 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 22 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 23 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 24 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 26 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 27 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 28 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 29 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 30 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 31 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 32 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 33 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 34 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 35 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 36 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 37 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 38 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 39 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 40 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 41 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 42 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 43 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 44 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 45 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 46 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 47 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 48 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 49 | 0.21 |
| (2,791) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 50 | 0.21 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 7 | 0.21 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 27 | 0.21 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 34 | 0.21 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 37 | 0.21 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 50 | 0.21 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 1 | 0.21 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 1 | 0.21 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 29 | 0.21 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 29 | 0.21 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 37 | 0.21 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 37 | 0.21 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 49 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.21 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.21 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 16 | 0.21 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 33 | 0.21 |
| (2,72) | 1:A:7:LYS:HA | 1:A:7:LYS:HB3 | 20 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 31 | 0.21 |
| (2,702) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 41 | 0.21 |
| (2,7) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 49 | 0.21 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 27 | 0.21 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 40 | 0.21 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 44 | 0.21 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 46 | 0.21 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 50 | 0.21 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.21 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.21 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.21 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 10 | 0.21 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 14 | 0.21 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 15 | 0.21 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 25 | 0.21 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 41 | 0.21 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.21 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.21 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 4 | 0.21 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 9 | 0.21 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 14 | 0.21 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 15 | 0.21 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 30 | 0.21 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 38 | 0.21 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 44 | 0.21 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 47 | 0.21 |
| (2,669) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 36 | 0.21 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 6 | 0.21 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 10 | 0.21 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 23 | 0.21 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 39 | 0.21 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 48 | 0.21 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 21 | 0.21 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 34 | 0.21 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 46 | 0.21 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 35 | 0.21 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 35 | 0.21 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 47 | 0.21 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 47 | 0.21 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 50 | 0.21 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 50 | 0.21 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 6 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,65) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 46 | 0.21 |
| (2,65) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 46 | 0.21 |
| (2,65) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 46 | 0.21 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 15 | 0.21 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 46 | 0.21 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 10 | 0.21 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 22 | 0.21 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 27 | 0.21 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 30 | 0.21 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 33 | 0.21 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 41 | 0.21 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 37 | 0.21 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 26 | 0.21 |
| (2,609) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 18 | 0.21 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 16 | 0.21 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 18 | 0.21 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 19 | 0.21 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 24 | 0.21 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 39 | 0.21 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 42 | 0.21 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 44 | 0.21 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 48 | 0.21 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 2 | 0.21 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 39 | 0.21 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 10 | 0.21 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 15 | 0.21 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 19 | 0.21 |
| (2,591) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 32 | 0.21 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 28 | 0.21 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 28 | 0.21 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 28 | 0.21 |
| (2,564) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 46 | 0.21 |
| (2,564) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 46 | 0.21 |
| (2,564) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 46 | 0.21 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 11 | 0.21 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 17 | 0.21 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 31 | 0.21 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 21 | 0.21 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 2 | 0.21 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 33 | 0.21 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 35 | 0.21 |
| (2,550) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 49 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 3 | 0.21 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 3 | 0.21 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 10 | 0.21 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 10 | 0.21 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 13 | 0.21 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 13 | 0.21 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 21 | 0.21 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 21 | 0.21 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 25 | 0.21 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 25 | 0.21 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 28 | 0.21 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 28 | 0.21 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 33 | 0.21 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 33 | 0.21 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 35 | 0.21 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 35 | 0.21 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 36 | 0.21 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 36 | 0.21 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 42 | 0.21 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 42 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 5 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 5 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 5 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 5 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 5 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 5 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 5 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 5 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 5 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 7 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 7 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 7 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 7 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 7 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 7 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 7 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 7 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 7 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 13 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 13 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 13 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 13 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 13 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 13 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 13 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 13 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 13 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 18 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 18 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 18 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 18 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 18 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 18 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 18 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 18 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 18 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 31 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 31 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 31 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 31 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 31 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 31 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 31 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 31 | 0.21 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 31 | 0.21 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 13 | 0.21 |
| (2,537) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 16 | 0.21 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 38 | 0.21 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 38 | 0.21 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 32 | 0.21 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 19 | 0.21 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 19 | 0.21 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 19 | 0.21 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 28 | 0.21 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 28 | 0.21 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 28 | 0.21 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 41 | 0.21 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 41 | 0.21 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 41 | 0.21 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 12 | 0.21 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 12 | 0.21 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 12 | 0.21 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 33 | 0.21 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 33 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 33 | 0.21 |
| (2,521) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HA | 37 | 0.21 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 9 | 0.21 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 38 | 0.21 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 40 | 0.21 |
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 19 | 0.21 |
| (2,472) | 1:A:7:LYS:HA | 1:A:7:LYS:HB3 | 20 | 0.21 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 21 | 0.21 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 37 | 0.21 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 38 | 0.21 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 38 | 0.21 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 11 | 0.21 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.21 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 6 | 0.21 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 32 | 0.21 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.21 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.21 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.21 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 15 | 0.21 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 46 | 0.21 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 19 | 0.21 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 19 | 0.21 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 19 | 0.21 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 28 | 0.21 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 28 | 0.21 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 28 | 0.21 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 41 | 0.21 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 41 | 0.21 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 41 | 0.21 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 12 | 0.21 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 12 | 0.21 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 12 | 0.21 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 33 | 0.21 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 33 | 0.21 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 33 | 0.21 |
| (2,419) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HA | 37 | 0.21 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 10 | 0.21 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 14 | 0.21 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 15 | 0.21 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 25 | 0.21 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 41 | 0.21 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 4 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 9 | 0.21 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 14 | 0.21 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 15 | 0.21 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 30 | 0.21 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 38 | 0.21 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 44 | 0.21 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 47 | 0.21 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 37 | 0.21 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 9 | 0.21 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 38 | 0.21 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 40 | 0.21 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 31 | 0.21 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 14 | 0.21 |
| (2,390) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 41 | 0.21 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 35 | 0.21 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 35 | 0.21 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 47 | 0.21 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 47 | 0.21 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 50 | 0.21 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 50 | 0.21 |
| (2,36) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 18 | 0.21 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 1 | 0.21 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 1 | 0.21 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 29 | 0.21 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 29 | 0.21 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 37 | 0.21 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 37 | 0.21 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 19 | 0.21 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 2 | 0.21 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 6 | 0.21 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 11 | 0.21 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 23 | 0.21 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 27 | 0.21 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 44 | 0.21 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 46 | 0.21 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 8 | 0.21 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 19 | 0.21 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 24 | 0.21 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 44 | 0.21 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 5 | 0.21 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 9 | 0.21 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 10 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 11 | 0.21 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 12 | 0.21 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 13 | 0.21 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 18 | 0.21 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 23 | 0.21 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 27 | 0.21 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 28 | 0.21 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 30 | 0.21 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 41 | 0.21 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 43 | 0.21 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 44 | 0.21 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 46 | 0.21 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 50 | 0.21 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 3 | 0.21 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 5 | 0.21 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 9 | 0.21 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 11 | 0.21 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 19 | 0.21 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 20 | 0.21 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 28 | 0.21 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 31 | 0.21 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 26 | 0.21 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 10 | 0.21 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 22 | 0.21 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 27 | 0.21 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 30 | 0.21 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 33 | 0.21 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 41 | 0.21 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 7 | 0.21 |
| (2,266) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 25 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 1 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 2 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 3 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 4 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 5 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 6 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 7 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 8 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 9 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 10 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 11 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 12 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 13 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 14 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 15 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 16 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 17 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 18 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 19 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 20 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 21 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 22 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 23 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 24 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 26 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 27 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 28 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 29 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 30 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 31 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 32 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 33 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 34 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 35 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 36 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 37 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 38 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 39 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 40 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 41 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 42 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 43 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 44 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 45 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 46 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 47 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 48 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 49 | 0.21 |
| (2,259) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 50 | 0.21 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 11 | 0.21 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 17 | 0.21 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 31 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.21 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 5 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 5 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 5 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 5 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 5 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 5 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 5 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 5 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 5 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 7 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 7 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 7 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 7 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 7 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 7 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 7 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 7 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 7 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 13 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 13 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 13 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 13 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 13 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 13 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 13 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 13 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 13 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 18 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 18 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 18 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 18 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 18 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 18 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 18 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 18 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 18 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 31 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 31 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 31 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 31 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 31 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 31 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 31 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 31 | 0.21 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 31 | 0.21 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 11 | 0.21 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 48 | 0.21 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 13 | 0.21 |
| (2,226) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 16 | 0.21 |
| (2,201) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 36 | 0.21 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 10 | 0.21 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 15 | 0.21 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 19 | 0.21 |
| (2,20) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 32 | 0.21 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 16 | 0.21 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 33 | 0.21 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 6 | 0.21 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 10 | 0.21 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 23 | 0.21 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 39 | 0.21 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 21 | 0.21 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 34 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 46 | 0.21 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 27 | 0.21 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 40 | 0.21 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 44 | 0.21 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 46 | 0.21 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 50 | 0.21 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 9 | 0.21 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 15 | 0.21 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 49 | 0.21 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 2 | 0.21 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 16 | 0.21 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 18 | 0.21 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 19 | 0.21 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 24 | 0.21 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 39 | 0.21 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 42 | 0.21 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 44 | 0.21 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 48 | 0.21 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 7 | 0.21 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 27 | 0.21 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 34 | 0.21 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 37 | 0.21 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 50 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 3 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 3 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 10 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 10 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 13 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 13 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 21 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 21 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 25 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 25 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 28 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 28 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 33 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 33 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 35 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 35 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 36 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 36 | 0.21 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 42 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 42 | 0.21 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 9 | 0.21 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 9 | 0.21 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 10 | 0.21 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 10 | 0.21 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 24 | 0.21 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 24 | 0.21 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 29 | 0.21 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 29 | 0.21 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 35 | 0.21 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 35 | 0.21 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 36 | 0.21 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 36 | 0.21 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 7 | 0.21 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 7 | 0.21 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 10 | 0.21 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 10 | 0.21 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 38 | 0.21 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 38 | 0.21 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2 | 14 | 0.21 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3 | 14 | 0.21 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2 | 37 | 0.21 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3 | 37 | 0.21 |
| (1,922) | 1:A:4:GLN:HA | 1:A:4:GLN:HG2 | 14 | 0.21 |
| (1,922) | 1:A:4:GLN:HA | 1:A:4:GLN:HG3 | 14 | 0.21 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 9 | 0.21 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 15 | 0.21 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 11 | 0.21 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 30 | 0.21 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 37 | 0.21 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 39 | 0.21 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 2 | 0.21 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 6 | 0.21 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 11 | 0.21 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 23 | 0.21 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 27 | 0.21 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 44 | 0.21 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 46 | 0.21 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 7 | 0.21 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 8 | 0.21 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 19 | 0.21 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 24 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 44 | 0.21 |
| (1,821) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 25 | 0.21 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 14 | 0.21 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 11 | 0.21 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 5 | 0.21 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 9 | 0.21 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 10 | 0.21 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 11 | 0.21 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 12 | 0.21 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 13 | 0.21 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 18 | 0.21 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 23 | 0.21 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 27 | 0.21 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 28 | 0.21 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 30 | 0.21 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 41 | 0.21 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 43 | 0.21 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 44 | 0.21 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 46 | 0.21 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 50 | 0.21 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 13 | 0.21 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 13 | 0.21 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 3 | 0.21 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 5 | 0.21 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 9 | 0.21 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 11 | 0.21 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 19 | 0.21 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 20 | 0.21 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 28 | 0.21 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 31 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 1 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 2 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 3 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 4 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 5 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 6 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 7 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 8 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 9 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 10 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 11 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 12 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 13 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 14 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 15 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 16 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 17 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 18 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 19 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 20 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 21 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 22 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 23 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 24 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 26 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 27 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 28 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 29 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 30 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 31 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 32 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 33 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 34 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 35 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 36 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 37 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 38 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 39 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 40 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 41 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 42 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 43 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 44 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 45 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 46 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 47 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 48 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 49 | 0.21 |
| (1,766) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 50 | 0.21 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 7 | 0.21 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 27 | 0.21 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 34 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 37 | 0.21 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 50 | 0.21 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 1 | 0.21 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 1 | 0.21 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 29 | 0.21 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 29 | 0.21 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 37 | 0.21 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 37 | 0.21 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 49 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.21 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 16 | 0.21 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 33 | 0.21 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 31 | 0.21 |
| (1,678) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 41 | 0.21 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 27 | 0.21 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 40 | 0.21 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 44 | 0.21 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 46 | 0.21 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 50 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.21 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.21 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.21 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 10 | 0.21 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 14 | 0.21 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 15 | 0.21 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 25 | 0.21 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 41 | 0.21 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 4 | 0.21 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 9 | 0.21 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 14 | 0.21 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 15 | 0.21 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 30 | 0.21 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 38 | 0.21 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 44 | 0.21 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 47 | 0.21 |
| (1,648) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:15:VAL:H | 36 | 0.21 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 6 | 0.21 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 10 | 0.21 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 23 | 0.21 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 39 | 0.21 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 48 | 0.21 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 21 | 0.21 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 34 | 0.21 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 46 | 0.21 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 35 | 0.21 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 35 | 0.21 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 47 | 0.21 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 47 | 0.21 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 50 | 0.21 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 50 | 0.21 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 6 | 0.21 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 15 | 0.21 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 46 | 0.21 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 10 | 0.21 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 22 | 0.21 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 27 | 0.21 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 30 | 0.21 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 33 | 0.21 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 41 | 0.21 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 37 | 0.21 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 26 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,592) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 18 | 0.21 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 16 | 0.21 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 18 | 0.21 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 19 | 0.21 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 24 | 0.21 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 39 | 0.21 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 42 | 0.21 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 44 | 0.21 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 48 | 0.21 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 2 | 0.21 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 10 | 0.21 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 15 | 0.21 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 19 | 0.21 |
| (1,574) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:3:PRO:HG2 | 32 | 0.21 |
| (1,554) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 46 | 0.21 |
| (1,554) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 46 | 0.21 |
| (1,554) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 46 | 0.21 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 11 | 0.21 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 17 | 0.21 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 31 | 0.21 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 21 | 0.21 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 2 | 0.21 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 33 | 0.21 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 35 | 0.21 |
| (1,540) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 49 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 3 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 3 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 10 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 10 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 13 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 13 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 21 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 21 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 25 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 25 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 28 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 28 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 33 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 33 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 35 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 35 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 36 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 36 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 42 | 0.21 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 42 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 5 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 5 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 5 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 5 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 5 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 5 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 5 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 5 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 5 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 7 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 7 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 7 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 7 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 7 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 7 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 7 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 7 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 7 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 13 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 13 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 13 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 13 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 13 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 13 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 13 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 13 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 13 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 18 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 18 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 18 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 18 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 18 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 18 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 18 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 18 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 18 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 31 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 31 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 31 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 31 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 31 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 31 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 31 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 31 | 0.21 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 31 | 0.21 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 13 | 0.21 |
| (1,527) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 16 | 0.21 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 38 | 0.21 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 38 | 0.21 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 32 | 0.21 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 19 | 0.21 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 19 | 0.21 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 19 | 0.21 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 28 | 0.21 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 28 | 0.21 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 28 | 0.21 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 41 | 0.21 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 41 | 0.21 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 41 | 0.21 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 12 | 0.21 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 12 | 0.21 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 12 | 0.21 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 33 | 0.21 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 33 | 0.21 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 33 | 0.21 |
| (1,511) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HA | 37 | 0.21 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 9 | 0.21 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 38 | 0.21 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 40 | 0.21 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 19 | 0.21 |
| (1,462) | 1:A:7:LYS:HA | 1:A:7:LYS:HB3 | 20 | 0.21 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 3 | 0.21 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 6 | 0.21 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 10 | 0.21 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 12 | 0.21 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 31 | 0.21 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 43 | 0.21 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 47 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 13 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:22:GLN:HG2 | 28 | 0.21 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 33 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 33 | 0.21 |
| (1,348) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 13 | 0.21 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 22 | 0.21 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 33 | 0.21 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 42 | 0.21 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 9 | 0.21 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 40 | 0.21 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 29 | 0.21 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 19 | 0.21 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 32 | 0.21 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 5 | 0.21 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 16 | 0.21 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 17 | 0.21 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 50 | 0.21 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 29 | 0.21 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 29 | 0.21 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 29 | 0.21 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 39 | 0.21 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 39 | 0.21 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 39 | 0.21 |
| (1,189) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 30 | 0.21 |
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:21:ASP:HA | 1 | 0.21 |
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:21:ASP:HA | 1 | 0.21 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 13 | 0.21 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 13 | 0.21 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 13 | 0.21 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:14:ASN:HB3 | 39 | 0.21 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:14:ASN:HB3 | 39 | 0.21 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:14:ASN:HB3 | 39 | 0.21 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 49 | 0.21 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 49 | 0.21 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 49 | 0.21 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 4 | 0.21 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 9 | 0.21 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 27 | 0.21 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 44 | 0.21 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 13 | 0.21 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 10 | 0.21 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 26 | 0.21 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 38 | 0.21 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 10 | 0.21 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 27 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 29 | 0.21 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 29 | 0.21 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 6 | 0.21 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 6 | 0.21 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 8 | 0.21 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 8 | 0.21 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 24 | 0.21 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 24 | 0.21 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 34 | 0.21 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 34 | 0.21 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:H | 4 | 0.21 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 4 | 0.21 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:H | 29 | 0.21 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 29 | 0.21 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 38 | 0.21 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 38 | 0.21 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 32 | 0.2 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 40 | 0.2 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 40 | 0.2 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 44 | 0.2 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 44 | 0.2 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 25 | 0.2 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 8 | 0.2 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 9 | 0.2 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.2 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 5 | 0.2 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 28 | 0.2 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 40 | 0.2 |
| (2,892) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 5 | 0.2 |
| (2,892) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 12 | 0.2 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 10 | 0.2 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 15 | 0.2 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 22 | 0.2 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 37 | 0.2 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 34 | 0.2 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 34 | 0.2 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 12 | 0.2 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 12 | 0.2 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 3 | 0.2 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 23 | 0.2 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 25 | 0.2 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 27 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 40 | 0.2 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 40 | 0.2 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 44 | 0.2 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 44 | 0.2 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 4 | 0.2 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 32 | 0.2 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 19 | 0.2 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 20 | 0.2 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 21 | 0.2 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 31 | 0.2 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 8 | 0.2 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 13 | 0.2 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 12 | 0.2 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 30 | 0.2 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 43 | 0.2 |
| (2,785) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB2 | 26 | 0.2 |
| (2,785) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB2 | 39 | 0.2 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 2 | 0.2 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 15 | 0.2 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 32 | 0.2 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 41 | 0.2 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 11 | 0.2 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 11 | 0.2 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 19 | 0.2 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 19 | 0.2 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 35 | 0.2 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 35 | 0.2 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 1 | 0.2 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 29 | 0.2 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 34 | 0.2 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 47 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.2 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.2 |
| (2,734) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD21 | 5 | 0.2 |
| (2,734) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD22 | 5 | 0.2 |
| (2,734) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD23 | 5 | 0.2 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 20 | 0.2 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 43 | 0.2 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 30 | 0.2 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 30 | 0.2 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 38 | 0.2 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 38 | 0.2 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 19 | 0.2 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 44 | 0.2 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 44 | 0.2 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 12 | 0.2 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.2 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.2 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.2 |
| (2,689) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 4 | 0.2 |
| (2,689) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 49 | 0.2 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 5 | 0.2 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 19 | 0.2 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 22 | 0.2 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 24 | 0.2 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 31 | 0.2 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 35 | 0.2 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 36 | 0.2 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 37 | 0.2 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 3 | 0.2 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 9 | 0.2 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 12 | 0.2 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 18 | 0.2 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 20 | 0.2 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 28 | 0.2 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 29 | 0.2 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 30 | 0.2 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 38 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 42 | 0.2 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 48 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 3 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 6 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 8 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 10 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 12 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 13 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 16 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 17 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 18 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 20 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 25 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 27 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 28 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 29 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 32 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 40 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 41 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 42 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 45 | 0.2 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 48 | 0.2 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 23 | 0.2 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 23 | 0.2 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 23 | 0.2 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:23:CYS:H | 37 | 0.2 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:23:CYS:H | 37 | 0.2 |
| (2,671) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:23:CYS:H | 37 | 0.2 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 10 | 0.2 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 10 | 0.2 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 10 | 0.2 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.2 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.2 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.2 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 16 | 0.2 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 24 | 0.2 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 28 | 0.2 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 30 | 0.2 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 37 | 0.2 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 45 | 0.2 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 12 | 0.2 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 12 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 12 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 1 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 2 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 3 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 4 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 5 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 6 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 7 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 8 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 9 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 10 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 11 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 12 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 13 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 14 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 15 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 16 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 17 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 18 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 19 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 20 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 21 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 22 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 23 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 24 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 25 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 26 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 27 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 28 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 29 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 30 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 31 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 32 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 33 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 34 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 35 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 36 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 37 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 38 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 39 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 40 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 41 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 42 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 43 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 44 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 45 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 46 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 47 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 49 | 0.2 |
| (2,659) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 50 | 0.2 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 4 | 0.2 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 16 | 0.2 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 26 | 0.2 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 32 | 0.2 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 33 | 0.2 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 40 | 0.2 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 44 | 0.2 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 47 | 0.2 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 28 | 0.2 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 28 | 0.2 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 39 | 0.2 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 39 | 0.2 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 40 | 0.2 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 40 | 0.2 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 9 | 0.2 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 11 | 0.2 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 13 | 0.2 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 20 | 0.2 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 27 | 0.2 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 6 | 0.2 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 8 | 0.2 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 27 | 0.2 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 34 | 0.2 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 47 | 0.2 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 4 | 0.2 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 25 | 0.2 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 43 | 0.2 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 16 | 0.2 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 2 | 0.2 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 3 | 0.2 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 4 | 0.2 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 13 | 0.2 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 35 | 0.2 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 38 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 50 | 0.2 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 30 | 0.2 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 12 | 0.2 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 12 | 0.2 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 18 | 0.2 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 18 | 0.2 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 25 | 0.2 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 25 | 0.2 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 25 | 0.2 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 10 | 0.2 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 10 | 0.2 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 10 | 0.2 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.2 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.2 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.2 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 22 | 0.2 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 34 | 0.2 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 38 | 0.2 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 12 | 0.2 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 23 | 0.2 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 24 | 0.2 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 8 | 0.2 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 13 | 0.2 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 44 | 0.2 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 44 | 0.2 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 47 | 0.2 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 47 | 0.2 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 47 | 0.2 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 47 | 0.2 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 47 | 0.2 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 47 | 0.2 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 47 | 0.2 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 47 | 0.2 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 47 | 0.2 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 2 | 0.2 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 19 | 0.2 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 42 | 0.2 |
| (2,530) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 42 | 0.2 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 6 | 0.2 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 6 | 0.2 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 6 | 0.2 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 15 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 15 | 0.2 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 15 | 0.2 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 24 | 0.2 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 24 | 0.2 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 24 | 0.2 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 29 | 0.2 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 29 | 0.2 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 29 | 0.2 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 34 | 0.2 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 34 | 0.2 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 34 | 0.2 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 46 | 0.2 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 46 | 0.2 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 46 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 3 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 3 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 3 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 9 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 9 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 9 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 20 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 20 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 20 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 22 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 22 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 22 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 27 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 27 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 27 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 35 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 35 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 35 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 38 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 38 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 38 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 43 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 43 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 43 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 50 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 50 | 0.2 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 50 | 0.2 |
| (2,522) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 37 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 1 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 2 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 3 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 4 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 5 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 6 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 7 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 8 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 10 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 11 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 12 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 13 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 14 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 15 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 16 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 17 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 18 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 19 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 20 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 21 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 23 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 24 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 25 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 27 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 28 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 29 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 30 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 31 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 32 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 34 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 35 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 36 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 37 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 39 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 41 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 42 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 43 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 44 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 45 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 46 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 47 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 48 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 49 | 0.2 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 50 | 0.2 |
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 14 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 1 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 2 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 3 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 4 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 5 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 6 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 7 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 8 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 9 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 10 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 11 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 12 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 13 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 14 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 15 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 16 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 17 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 18 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 19 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 20 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 21 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 22 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 23 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 24 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 25 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 26 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 27 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 28 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 29 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 30 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 31 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 32 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 33 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 34 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 35 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 36 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 37 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 38 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 39 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 40 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 41 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 42 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 43 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 44 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 45 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 46 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 47 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 48 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 49 | 0.2 |
| (2,506) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 50 | 0.2 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 12 | 0.2 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 23 | 0.2 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 24 | 0.2 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 5 | 0.2 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 28 | 0.2 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 30 | 0.2 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 30 | 0.2 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 38 | 0.2 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 38 | 0.2 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 25 | 0.2 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 42 | 0.2 |
| (2,458) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 42 | 0.2 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 8 | 0.2 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 9 | 0.2 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.2 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 9 | 0.2 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 11 | 0.2 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 13 | 0.2 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 20 | 0.2 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 27 | 0.2 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.2 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.2 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.2 |
| (2,433) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD21 | 5 | 0.2 |
| (2,433) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD22 | 5 | 0.2 |
| (2,433) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD23 | 5 | 0.2 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 6 | 0.2 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 8 | 0.2 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 27 | 0.2 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 34 | 0.2 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 47 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 6 | 0.2 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 6 | 0.2 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 6 | 0.2 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 15 | 0.2 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 15 | 0.2 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 15 | 0.2 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 24 | 0.2 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 24 | 0.2 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 24 | 0.2 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 29 | 0.2 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 29 | 0.2 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 29 | 0.2 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 34 | 0.2 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 34 | 0.2 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 34 | 0.2 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 46 | 0.2 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 46 | 0.2 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 46 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 3 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 3 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 3 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 9 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 9 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 9 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 20 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 20 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 20 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 22 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 22 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 22 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 27 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 27 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 27 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 35 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 35 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 35 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 38 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 38 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 38 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 43 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 43 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 43 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 50 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 50 | 0.2 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 50 | 0.2 |
| (2,420) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 37 | 0.2 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 5 | 0.2 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 19 | 0.2 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 22 | 0.2 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 24 | 0.2 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 31 | 0.2 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 35 | 0.2 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 36 | 0.2 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 37 | 0.2 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 3 | 0.2 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 9 | 0.2 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 12 | 0.2 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 18 | 0.2 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 20 | 0.2 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 28 | 0.2 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 29 | 0.2 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 30 | 0.2 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 38 | 0.2 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 42 | 0.2 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 48 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 3 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 6 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 8 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 10 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 12 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 13 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 16 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 17 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 18 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 20 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 25 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 27 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 28 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 29 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 32 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 40 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 41 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 42 | 0.2 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 45 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 48 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 1 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 2 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 3 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 4 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 5 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 6 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 7 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 8 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 10 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 11 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 12 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 13 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 14 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 15 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 16 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 17 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 18 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 19 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 20 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 21 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 23 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 24 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 25 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 27 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 28 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 29 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 30 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 31 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 32 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 34 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 35 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 36 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 37 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 39 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 41 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 42 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 43 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 44 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 45 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 46 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 47 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 48 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 49 | 0.2 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 50 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 1 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 2 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 3 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 4 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 5 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 6 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 7 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 8 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 9 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 10 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 11 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 12 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 13 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 14 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 15 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 16 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 17 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 18 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 19 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 20 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 21 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 22 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 23 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 24 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 25 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 26 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 27 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 28 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 29 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 30 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 31 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 32 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 33 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 34 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 35 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 36 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 37 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 38 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 39 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 40 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 41 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 42 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 43 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 44 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 45 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 46 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 47 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 48 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 49 | 0.2 |
| (2,398) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 50 | 0.2 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 4 | 0.2 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 32 | 0.2 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 44 | 0.2 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 28 | 0.2 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 28 | 0.2 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 39 | 0.2 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 39 | 0.2 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 40 | 0.2 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 40 | 0.2 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 43 | 0.2 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 11 | 0.2 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 11 | 0.2 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 19 | 0.2 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 19 | 0.2 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 35 | 0.2 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 35 | 0.2 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 14 | 0.2 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 19 | 0.2 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 44 | 0.2 |
| (2,33) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 5 | 0.2 |
| (2,33) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 12 | 0.2 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 10 | 0.2 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 15 | 0.2 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 22 | 0.2 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 3 | 0.2 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 23 | 0.2 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 25 | 0.2 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 27 | 0.2 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 19 | 0.2 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 20 | 0.2 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 21 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 31 | 0.2 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 12 | 0.2 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 30 | 0.2 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 12 | 0.2 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 34 | 0.2 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 34 | 0.2 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 16 | 0.2 |
| (2,287) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB2 | 26 | 0.2 |
| (2,287) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB2 | 39 | 0.2 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 4 | 0.2 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 25 | 0.2 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 37 | 0.2 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 22 | 0.2 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 34 | 0.2 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 38 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.2 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.2 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 47 | 0.2 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 47 | 0.2 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 47 | 0.2 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 47 | 0.2 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 47 | 0.2 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 47 | 0.2 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 47 | 0.2 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 47 | 0.2 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 47 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 1 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 2 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 3 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 4 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 5 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 6 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 7 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 8 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 9 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 10 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 11 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 12 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 13 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 14 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 15 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 16 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 17 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 18 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 19 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 20 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 21 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 22 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 23 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 24 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 25 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 26 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 27 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 28 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 29 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 30 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 31 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 32 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 33 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 34 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 35 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 36 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 37 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 38 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 39 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 40 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 41 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 42 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 43 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 44 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 45 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 46 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 47 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 49 | 0.2 |
| (2,231) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 50 | 0.2 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 2 | 0.2 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 19 | 0.2 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 12 | 0.2 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 12 | 0.2 |
| (2,196) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 4 | 0.2 |
| (2,196) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 49 | 0.2 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 12 | 0.2 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 20 | 0.2 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 43 | 0.2 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 40 | 0.2 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 16 | 0.2 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 24 | 0.2 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 28 | 0.2 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 30 | 0.2 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 37 | 0.2 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 45 | 0.2 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 4 | 0.2 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 16 | 0.2 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 26 | 0.2 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 32 | 0.2 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 33 | 0.2 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 40 | 0.2 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 44 | 0.2 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 47 | 0.2 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 12 | 0.2 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 32 | 0.2 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 1 | 0.2 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 29 | 0.2 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 34 | 0.2 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 47 | 0.2 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 30 | 0.2 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 18 | 0.2 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 18 | 0.2 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 43 | 0.2 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 2 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 3 | 0.2 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 4 | 0.2 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 13 | 0.2 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 35 | 0.2 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 38 | 0.2 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 50 | 0.2 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 2 | 0.2 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 15 | 0.2 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 32 | 0.2 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 41 | 0.2 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 44 | 0.2 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 44 | 0.2 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 6 | 0.2 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 6 | 0.2 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 8 | 0.2 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 8 | 0.2 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 31 | 0.2 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 31 | 0.2 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 36 | 0.2 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 36 | 0.2 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 44 | 0.2 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 44 | 0.2 |
| (1,996) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 19 | 0.2 |
| (1,996) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 19 | 0.2 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD3 | 45 | 0.2 |
| (1,994) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HD2 | 45 | 0.2 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG3 | 7 | 0.2 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG2 | 7 | 0.2 |
| (1,956) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 40 | 0.2 |
| (1,956) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 40 | 0.2 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 15 | 0.2 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 15 | 0.2 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 19 | 0.2 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 19 | 0.2 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 34 | 0.2 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 34 | 0.2 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 32 | 0.2 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 40 | 0.2 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 40 | 0.2 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 44 | 0.2 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 44 | 0.2 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 25 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 8 | 0.2 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 9 | 0.2 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.2 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 5 | 0.2 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 28 | 0.2 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 40 | 0.2 |
| (1,866) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 5 | 0.2 |
| (1,866) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 12 | 0.2 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 10 | 0.2 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 15 | 0.2 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 22 | 0.2 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 37 | 0.2 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 34 | 0.2 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 34 | 0.2 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 12 | 0.2 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 12 | 0.2 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 3 | 0.2 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 23 | 0.2 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 25 | 0.2 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 27 | 0.2 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 4 | 0.2 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 32 | 0.2 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 19 | 0.2 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 20 | 0.2 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 21 | 0.2 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 31 | 0.2 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 15 | 0.2 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 15 | 0.2 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 31 | 0.2 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 31 | 0.2 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 12 | 0.2 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 30 | 0.2 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 43 | 0.2 |
| (1,760) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB2 | 26 | 0.2 |
| (1,760) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB2 | 39 | 0.2 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 2 | 0.2 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 15 | 0.2 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 32 | 0.2 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 41 | 0.2 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 11 | 0.2 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 11 | 0.2 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 19 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 19 | 0.2 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 35 | 0.2 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 35 | 0.2 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 1 | 0.2 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 29 | 0.2 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 34 | 0.2 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 47 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.2 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.2 |
| (1,710) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD21 | 5 | 0.2 |
| (1,710) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD22 | 5 | 0.2 |
| (1,710) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD23 | 5 | 0.2 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 20 | 0.2 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 43 | 0.2 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 30 | 0.2 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 30 | 0.2 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 38 | 0.2 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 38 | 0.2 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 19 | 0.2 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 44 | 0.2 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 44 | 0.2 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 12 | 0.2 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.2 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.2 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 29 | 0.2 |
| (1,666) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 4 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,666) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 49 | 0.2 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 5 | 0.2 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 19 | 0.2 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 22 | 0.2 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 24 | 0.2 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 31 | 0.2 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 35 | 0.2 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 36 | 0.2 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 37 | 0.2 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 3 | 0.2 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 9 | 0.2 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 12 | 0.2 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 18 | 0.2 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 20 | 0.2 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 28 | 0.2 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 29 | 0.2 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 30 | 0.2 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 38 | 0.2 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 42 | 0.2 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 48 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 3 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 6 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 8 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 10 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 12 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 13 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 16 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 17 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 18 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 20 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 25 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 27 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 28 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 29 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 32 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 40 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 41 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 42 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 45 | 0.2 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 48 | 0.2 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 16 | 0.2 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 24 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 28 | 0.2 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 30 | 0.2 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 37 | 0.2 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 45 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 1 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 2 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 3 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 4 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 5 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 6 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 7 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 8 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 9 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 10 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 11 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 12 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 13 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 14 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 15 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 16 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 17 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 18 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 19 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 20 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 21 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 22 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 23 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 24 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 25 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 26 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 27 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 28 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 29 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 30 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 31 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 32 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 33 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 34 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 35 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 36 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 37 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 38 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 39 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 40 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 41 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 42 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 43 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 44 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 45 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 46 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 47 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 49 | 0.2 |
| (1,640) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:17:LYS:HD3 | 50 | 0.2 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 4 | 0.2 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 16 | 0.2 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 26 | 0.2 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 32 | 0.2 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 33 | 0.2 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 40 | 0.2 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 44 | 0.2 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 47 | 0.2 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 28 | 0.2 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 28 | 0.2 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 39 | 0.2 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 39 | 0.2 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 40 | 0.2 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 40 | 0.2 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 9 | 0.2 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 11 | 0.2 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 13 | 0.2 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 20 | 0.2 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 27 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 6 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 8 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 27 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 34 | 0.2 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 47 | 0.2 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 4 | 0.2 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 25 | 0.2 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 43 | 0.2 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 16 | 0.2 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 2 | 0.2 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 3 | 0.2 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 4 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 13 | 0.2 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 35 | 0.2 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 38 | 0.2 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 50 | 0.2 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 30 | 0.2 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 12 | 0.2 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 12 | 0.2 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 18 | 0.2 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 18 | 0.2 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 10 | 0.2 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 10 | 0.2 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 10 | 0.2 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.2 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.2 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.2 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 22 | 0.2 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 34 | 0.2 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 38 | 0.2 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 12 | 0.2 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 23 | 0.2 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 24 | 0.2 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 8 | 0.2 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 13 | 0.2 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 44 | 0.2 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 44 | 0.2 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 47 | 0.2 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 47 | 0.2 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 47 | 0.2 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 47 | 0.2 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 47 | 0.2 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 47 | 0.2 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 47 | 0.2 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 47 | 0.2 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 47 | 0.2 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 2 | 0.2 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 19 | 0.2 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD2 | 42 | 0.2 |
| (1,520) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HD3 | 42 | 0.2 |
| (1,52) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 18 | 0.2 |
| (1,52) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 18 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 6 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 6 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 6 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 15 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 15 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 15 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 24 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 24 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 24 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 29 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 29 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 29 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 34 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 34 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 34 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 46 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 46 | 0.2 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 46 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 3 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 3 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 3 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 9 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 9 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 9 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 20 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 20 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 20 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 22 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 22 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 22 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 27 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 27 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 27 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 35 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 35 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 35 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 38 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 38 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 38 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 43 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 43 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 43 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 50 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 50 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 50 | 0.2 |
| (1,512) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 37 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 1 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 2 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 3 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 4 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 5 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 6 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 7 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 8 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 10 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 11 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 12 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 13 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 14 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 15 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 16 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 17 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 18 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 19 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 20 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 21 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 23 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 24 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 25 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 27 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 28 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 29 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 30 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 31 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 32 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 34 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 35 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 36 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 37 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 39 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 41 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 42 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 43 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 44 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 45 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 46 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 47 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 48 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 49 | 0.2 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 50 | 0.2 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 14 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 1 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 2 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 3 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 4 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 5 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 6 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 7 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 8 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 9 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 10 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 11 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 12 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 13 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 14 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 15 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 16 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 17 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 18 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 19 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 20 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 21 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 22 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 23 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 24 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 25 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 26 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 27 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 28 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 29 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 30 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 31 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 32 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 33 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 34 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 35 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 36 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 37 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 38 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 39 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 40 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 41 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 42 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 43 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 44 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 45 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 46 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 47 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 48 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 49 | 0.2 |
| (1,496) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HD3 | 50 | 0.2 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 8 | 0.2 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 20 | 0.2 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 30 | 0.2 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 35 | 0.2 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 46 | 0.2 |
| (1,348) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 22 | 0.2 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 37 | 0.2 |
| (1,320) | 1:A:28:SER:H | 1:A:28:SER:HB3 | 26 | 0.2 |
| (1,301) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:14:ASN:HB3 | 4 | 0.2 |
| (1,301) | 1:A:14:ASN:H | 1:A:14:ASN:HB3 | 29 | 0.2 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 1 | 0.2 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 33 | 0.2 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 34 | 0.2 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 1 | 0.2 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 19 | 0.2 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 26 | 0.2 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 27 | 0.2 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 33 | 0.2 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 34 | 0.2 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 37 | 0.2 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 47 | 0.2 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 3 | 0.2 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 3 | 0.2 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 3 | 0.2 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 7 | 0.2 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 7 | 0.2 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 7 | 0.2 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 26 | 0.2 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 26 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 26 | 0.2 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 3 | 0.2 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 3 | 0.2 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 3 | 0.2 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 22 | 0.2 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 22 | 0.2 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 22 | 0.2 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 43 | 0.2 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 43 | 0.2 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 43 | 0.2 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 14 | 0.2 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 14 | 0.2 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 14 | 0.2 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 36 | 0.2 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 36 | 0.2 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 36 | 0.2 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 15 | 0.2 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 45 | 0.2 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 18 | 0.2 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 3 | 0.2 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 8 | 0.2 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 12 | 0.2 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 22 | 0.2 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 33 | 0.2 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 46 | 0.2 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 9 | 0.2 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 9 | 0.2 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 9 | 0.2 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 9 | 0.2 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 9 | 0.2 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 9 | 0.2 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 37 | 0.2 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 37 | 0.2 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 37 | 0.2 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 37 | 0.2 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 37 | 0.2 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 37 | 0.2 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 45 | 0.2 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 45 | 0.2 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 45 | 0.2 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 45 | 0.2 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 45 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 45 | 0.2 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:HD21 | 5 | 0.2 |
| (1,1037) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:HD21 | 5 | 0.2 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 5 | 0.2 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 5 | 0.2 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 45 | 0.2 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 45 | 0.2 |
| (1,1030) | 1:A:8:TYR:HD1 | 1:A:11:GLU:HB2 | 49 | 0.2 |
| (1,1030) | 1:A:8:TYR:HD2 | 1:A:11:GLU:HB2 | 49 | 0.2 |
| (1,1030) | 1:A:8:TYR:HD1 | 1:A:12:GLN:HG3 | 49 | 0.2 |
| (1,1030) | 1:A:8:TYR:HD2 | 1:A:12:GLN:HG3 | 49 | 0.2 |
| (1,1030) | 1:A:8:TYR:HD1 | 1:A:12:GLN:HG2 | 49 | 0.2 |
| (1,1030) | 1:A:8:TYR:HD2 | 1:A:12:GLN:HG2 | 49 | 0.2 |
| (1,1027) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 42 | 0.2 |
| (1,1027) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 42 | 0.2 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HG2 | 5 | 0.2 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HG2 | 5 | 0.2 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HG2 | 5 | 0.2 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.2 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.2 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 5 | 0.2 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 12 | 0.2 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 12 | 0.2 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 38 | 0.2 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 38 | 0.2 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 40 | 0.2 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 40 | 0.2 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 42 | 0.2 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 42 | 0.2 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 44 | 0.2 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 44 | 0.2 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 23 | 0.19 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 13 | 0.19 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 29 | 0.19 |
| (2,922) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:10:TYR:H | 50 | 0.19 |
| (2,922) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:10:TYR:H | 50 | 0.19 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 7 | 0.19 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 7 | 0.19 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 10 | 0.19 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 10 | 0.19 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 7 | 0.19 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 32 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.19 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 33 | 0.19 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.19 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.19 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 17 | 0.19 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 33 | 0.19 |
| (2,899) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 15 | 0.19 |
| (2,892) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 39 | 0.19 |
| (2,892) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 49 | 0.19 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 4 | 0.19 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 25 | 0.19 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 42 | 0.19 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 31 | 0.19 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 14 | 0.19 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 49 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 1 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 3 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 5 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 6 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 7 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 9 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 11 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 12 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 13 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 14 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 15 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 17 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 19 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 20 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 21 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 23 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 24 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 25 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 26 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 29 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 31 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 32 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 33 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 34 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 35 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 36 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 38 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 39 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 40 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 41 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 42 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 43 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 44 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 46 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 47 | 0.19 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 48 | 0.19 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 22 | 0.19 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 25 | 0.19 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 21 | 0.19 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 7 | 0.19 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 21 | 0.19 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 32 | 0.19 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 42 | 0.19 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 48 | 0.19 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 7 | 0.19 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 7 | 0.19 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 10 | 0.19 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 10 | 0.19 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 27 | 0.19 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 40 | 0.19 |
| (2,841) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 40 | 0.19 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 37 | 0.19 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 16 | 0.19 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 36 | 0.19 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 46 | 0.19 |
| (2,794) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 10 | 0.19 |
| (2,794) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 13 | 0.19 |
| (2,794) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 43 | 0.19 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 46 | 0.19 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 17 | 0.19 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 17 | 0.19 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 31 | 0.19 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 31 | 0.19 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 34 | 0.19 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 34 | 0.19 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 44 | 0.19 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 44 | 0.19 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 3 | 0.19 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 12 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 14 | 0.19 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 39 | 0.19 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 39 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.19 |
| (2,739) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.19 |
| (2,734) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD21 | 39 | 0.19 |
| (2,734) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD22 | 39 | 0.19 |
| (2,734) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD23 | 39 | 0.19 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 45 | 0.19 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 24 | 0.19 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 24 | 0.19 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 37 | 0.19 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 37 | 0.19 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 1 | 0.19 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 39 | 0.19 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.19 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.19 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.19 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 14 | 0.19 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 14 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 14 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 1 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 2 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 3 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 6 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 7 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 8 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 11 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 13 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 16 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 17 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 20 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 21 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 23 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 26 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 29 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 30 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 32 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 33 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 34 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 39 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 41 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 43 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 45 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 46 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 48 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 49 | 0.19 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 50 | 0.19 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 2 | 0.19 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 6 | 0.19 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 7 | 0.19 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 8 | 0.19 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 11 | 0.19 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 16 | 0.19 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 17 | 0.19 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 22 | 0.19 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 26 | 0.19 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 27 | 0.19 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 32 | 0.19 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 34 | 0.19 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 43 | 0.19 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 45 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 49 | 0.19 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 50 | 0.19 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 12 | 0.19 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 28 | 0.19 |
| (2,676) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:14:ASN:H | 5 | 0.19 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.19 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 1 | 0.19 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 2 | 0.19 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 7 | 0.19 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 11 | 0.19 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 19 | 0.19 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 21 | 0.19 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 22 | 0.19 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 23 | 0.19 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 26 | 0.19 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 31 | 0.19 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 33 | 0.19 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 34 | 0.19 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 36 | 0.19 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 39 | 0.19 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 43 | 0.19 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 46 | 0.19 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 49 | 0.19 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 50 | 0.19 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 36 | 0.19 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 36 | 0.19 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 36 | 0.19 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 41 | 0.19 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 43 | 0.19 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 27 | 0.19 |
| (2,655) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 11 | 0.19 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 43 | 0.19 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 43 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 3 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 26 | 0.19 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 48 | 0.19 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 9 | 0.19 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 12 | 0.19 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 14 | 0.19 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 21 | 0.19 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 43 | 0.19 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 50 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 50 | 0.19 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 50 | 0.19 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 9 | 0.19 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 8 | 0.19 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 40 | 0.19 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 28 | 0.19 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 31 | 0.19 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 1 | 0.19 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 22 | 0.19 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 34 | 0.19 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 45 | 0.19 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 47 | 0.19 |
| (2,607) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 44 | 0.19 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 16 | 0.19 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 1 | 0.19 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 1 | 0.19 |
| (2,6) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 15 | 0.19 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG11 | 43 | 0.19 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG12 | 43 | 0.19 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG13 | 43 | 0.19 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 43 | 0.19 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 43 | 0.19 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 43 | 0.19 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 43 | 0.19 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 43 | 0.19 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 43 | 0.19 |
| (2,582) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 5 | 0.19 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 37 | 0.19 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 37 | 0.19 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 37 | 0.19 |
| (2,579) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 31 | 0.19 |
| (2,579) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 31 | 0.19 |
| (2,579) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 31 | 0.19 |
| (2,579) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 31 | 0.19 |
| (2,579) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 31 | 0.19 |
| (2,579) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 31 | 0.19 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 36 | 0.19 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 36 | 0.19 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 36 | 0.19 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 50 | 0.19 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 50 | 0.19 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 50 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 9 | 0.19 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 24 | 0.19 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 29 | 0.19 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 46 | 0.19 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 48 | 0.19 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 49 | 0.19 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 3 | 0.19 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 16 | 0.19 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 36 | 0.19 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 34 | 0.19 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 34 | 0.19 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 39 | 0.19 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 39 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 10 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 10 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 10 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 10 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 10 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 10 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 10 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 10 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 10 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 12 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 12 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 12 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 12 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 12 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 12 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 12 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 12 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 12 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 14 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 14 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 14 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 14 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 14 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 14 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 14 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 14 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 14 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 23 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 23 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 23 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 23 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 23 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 23 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 23 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 23 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 23 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 26 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 26 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 26 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 26 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 26 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 26 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 26 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 26 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 26 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 28 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 28 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 28 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 28 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 28 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 28 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 28 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 28 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 28 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 30 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 30 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 30 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 30 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 30 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 30 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 30 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 30 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 30 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 33 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 33 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 33 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 33 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 33 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 33 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 33 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 33 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 33 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 34 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 34 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 34 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 34 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 34 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 34 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 34 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 34 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 34 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 35 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 35 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 35 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 35 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 35 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 35 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 35 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 35 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 35 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 36 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 36 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 36 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 36 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 36 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 36 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 36 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 36 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 36 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 38 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 38 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 38 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 38 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 38 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 38 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 38 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 38 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 38 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 39 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 39 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 39 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 39 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 39 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 39 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 39 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 39 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 39 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 44 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 44 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 44 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 44 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 44 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 44 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 44 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 44 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 44 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 45 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 45 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 45 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 45 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 45 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 45 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 45 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 45 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 45 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 49 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 49 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 49 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 49 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 49 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 49 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 49 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 49 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 49 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.19 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.19 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 11 | 0.19 |
| (2,526) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 39 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 1 | 0.19 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 1 | 0.19 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 1 | 0.19 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 7 | 0.19 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 7 | 0.19 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 7 | 0.19 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 11 | 0.19 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 11 | 0.19 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 11 | 0.19 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 32 | 0.19 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 32 | 0.19 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 32 | 0.19 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 48 | 0.19 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 48 | 0.19 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 48 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 2 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 2 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 2 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 10 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 10 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 10 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 13 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 13 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 13 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 14 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 14 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 14 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 16 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 16 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 16 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 17 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 17 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 17 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 23 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 23 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 23 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 26 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 26 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 26 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 40 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 40 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 40 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 44 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 44 | 0.19 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 44 | 0.19 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 22 | 0.19 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 26 | 0.19 |
| (2,518) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 33 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 1 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 3 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 5 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 6 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 7 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 9 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 11 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 12 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 13 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 14 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 15 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 17 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 19 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 20 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 21 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 23 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 24 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 25 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 26 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 29 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 31 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 32 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 33 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 34 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 35 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 36 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 38 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 39 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 40 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 41 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 42 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 43 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 44 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 46 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 47 | 0.19 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 48 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 3 | 0.19 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 17 | 0.19 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 33 | 0.19 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 24 | 0.19 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 24 | 0.19 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 37 | 0.19 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 37 | 0.19 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 7 | 0.19 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 32 | 0.19 |
| (2,461) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 10 | 0.19 |
| (2,461) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 13 | 0.19 |
| (2,461) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 43 | 0.19 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 23 | 0.19 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.19 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 33 | 0.19 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.19 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.19 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 3 | 0.19 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 26 | 0.19 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 48 | 0.19 |
| (2,440) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 39 | 0.19 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.19 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.19 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.19 |
| (2,436) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 44 | 0.19 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 39 | 0.19 |
| (2,433) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD21 | 39 | 0.19 |
| (2,433) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD22 | 39 | 0.19 |
| (2,433) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD23 | 39 | 0.19 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 9 | 0.19 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 12 | 0.19 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 14 | 0.19 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 21 | 0.19 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 43 | 0.19 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 1 | 0.19 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 1 | 0.19 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 1 | 0.19 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 7 | 0.19 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 7 | 0.19 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 7 | 0.19 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 11 | 0.19 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 11 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 11 | 0.19 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 32 | 0.19 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 32 | 0.19 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 32 | 0.19 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 48 | 0.19 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 48 | 0.19 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 48 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 2 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 2 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 2 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 10 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 10 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 10 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 13 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 13 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 13 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 14 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 14 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 14 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 16 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 16 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 16 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 17 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 17 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 17 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 23 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 23 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 23 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 26 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 26 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 26 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 40 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 40 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 40 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 44 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 44 | 0.19 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 44 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 1 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 2 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 3 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 6 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 7 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 8 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 11 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 13 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 16 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 17 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 20 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 21 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 23 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 26 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 29 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 30 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 32 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 33 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 34 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 39 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 41 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 43 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 45 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 46 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 48 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 49 | 0.19 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 50 | 0.19 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 2 | 0.19 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 6 | 0.19 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 7 | 0.19 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 8 | 0.19 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 11 | 0.19 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 16 | 0.19 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 17 | 0.19 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 22 | 0.19 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 26 | 0.19 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 27 | 0.19 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 32 | 0.19 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 34 | 0.19 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 43 | 0.19 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 45 | 0.19 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 49 | 0.19 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 50 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 1 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 2 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 7 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 11 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 19 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 21 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 22 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 23 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 26 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 31 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 33 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 34 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 36 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 39 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 43 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 46 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 49 | 0.19 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 50 | 0.19 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 22 | 0.19 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 26 | 0.19 |
| (2,402) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 33 | 0.19 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 27 | 0.19 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 1 | 0.19 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 39 | 0.19 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 43 | 0.19 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 43 | 0.19 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG11 | 43 | 0.19 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG12 | 43 | 0.19 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG13 | 43 | 0.19 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 43 | 0.19 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 43 | 0.19 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 43 | 0.19 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 43 | 0.19 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 43 | 0.19 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 43 | 0.19 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 17 | 0.19 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 17 | 0.19 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 31 | 0.19 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 31 | 0.19 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 34 | 0.19 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 34 | 0.19 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 44 | 0.19 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 44 | 0.19 |
| (2,33) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 39 | 0.19 |
| (2,33) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 49 | 0.19 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 14 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 14 | 0.19 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 14 | 0.19 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 4 | 0.19 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 25 | 0.19 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 42 | 0.19 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 7 | 0.19 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 21 | 0.19 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 32 | 0.19 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 42 | 0.19 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 48 | 0.19 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 37 | 0.19 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 46 | 0.19 |
| (2,315) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 5 | 0.19 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 22 | 0.19 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 25 | 0.19 |
| (2,300) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 31 | 0.19 |
| (2,300) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 31 | 0.19 |
| (2,300) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 31 | 0.19 |
| (2,300) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 31 | 0.19 |
| (2,300) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 31 | 0.19 |
| (2,300) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 31 | 0.19 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 28 | 0.19 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 31 | 0.19 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 9 | 0.19 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 40 | 0.19 |
| (2,269) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 40 | 0.19 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 31 | 0.19 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 9 | 0.19 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 24 | 0.19 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 29 | 0.19 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 46 | 0.19 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 48 | 0.19 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 49 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.19 |
| (2,243) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 10 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 10 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 10 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 10 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 10 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 10 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 10 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 10 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 10 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 12 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 12 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 12 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 12 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 12 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 12 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 12 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 12 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 12 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 14 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 14 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 14 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 14 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 14 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 14 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 14 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 14 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 14 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 23 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 23 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 23 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 23 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 23 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 23 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 23 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 23 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 23 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 26 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 26 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 26 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 26 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 26 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 26 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 26 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 26 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 26 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 28 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 28 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 28 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 28 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 28 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 28 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 28 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 28 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 28 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 30 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 30 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 30 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 30 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 30 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 30 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 30 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 30 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 30 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 33 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 33 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 33 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 33 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 33 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 33 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 33 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 33 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 33 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 34 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 34 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 34 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 34 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 34 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 34 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 34 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 34 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 34 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 35 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 35 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 35 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 35 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 35 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 35 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 35 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 35 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 35 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 36 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 36 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 36 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 36 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 36 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 36 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 36 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 36 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 36 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 38 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 38 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 38 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 38 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 38 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 38 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 38 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 38 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 38 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 39 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 39 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 39 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 39 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 39 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 39 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 39 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 39 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 39 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 44 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 44 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 44 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 44 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 44 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 44 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 44 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 44 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 44 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 45 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 45 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 45 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 45 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 45 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 45 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 45 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 45 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 45 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 49 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 49 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 49 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 49 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 49 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 49 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 49 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 49 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 49 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.19 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 11 | 0.19 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 21 | 0.19 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 1 | 0.19 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 1 | 0.19 |
| (2,198) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 11 | 0.19 |
| (2,190) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:14:ASN:H | 5 | 0.19 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 14 | 0.19 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 49 | 0.19 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 45 | 0.19 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 12 | 0.19 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 28 | 0.19 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 41 | 0.19 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 43 | 0.19 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 27 | 0.19 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 13 | 0.19 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 29 | 0.19 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 3 | 0.19 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 12 | 0.19 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 14 | 0.19 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 39 | 0.19 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 16 | 0.19 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 8 | 0.19 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 40 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:10:TYR:H | 50 | 0.19 |
| (2,138) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:10:TYR:H | 50 | 0.19 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 1 | 0.19 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 22 | 0.19 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 34 | 0.19 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 45 | 0.19 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 47 | 0.19 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 46 | 0.19 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 34 | 0.19 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 34 | 0.19 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 39 | 0.19 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 39 | 0.19 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 11 | 0.19 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 11 | 0.19 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 26 | 0.19 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 26 | 0.19 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 33 | 0.19 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 33 | 0.19 |
| (1,996) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 44 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,996) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 44 | 0.19 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 2 | 0.19 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 2 | 0.19 |
| (1,922) | 1:A:4:GLN:HA | 1:A:4:GLN:HG2 | 9 | 0.19 |
| (1,922) | 1:A:4:GLN:HA | 1:A:4:GLN:HG3 | 9 | 0.19 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 23 | 0.19 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 13 | 0.19 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 29 | 0.19 |
| (1,896) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:10:TYR:H | 50 | 0.19 |
| (1,896) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:10:TYR:H | 50 | 0.19 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 7 | 0.19 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 7 | 0.19 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 10 | 0.19 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 10 | 0.19 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 7 | 0.19 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 32 | 0.19 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 21 | 0.19 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 33 | 0.19 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 39 | 0.19 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 50 | 0.19 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 17 | 0.19 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 33 | 0.19 |
| (1,873) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 15 | 0.19 |
| (1,866) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 39 | 0.19 |
| (1,866) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 49 | 0.19 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 4 | 0.19 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 25 | 0.19 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 42 | 0.19 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 31 | 0.19 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 14 | 0.19 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 49 | 0.19 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 22 | 0.19 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 25 | 0.19 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 21 | 0.19 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 7 | 0.19 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 21 | 0.19 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 32 | 0.19 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 42 | 0.19 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 48 | 0.19 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 27 | 0.19 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB2 | 40 | 0.19 |
| (1,815) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:22:GLN:HB3 | 40 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 37 | 0.19 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 46 | 0.19 |
| (1,769) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 10 | 0.19 |
| (1,769) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 13 | 0.19 |
| (1,769) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 43 | 0.19 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 46 | 0.19 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 17 | 0.19 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 17 | 0.19 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 31 | 0.19 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 31 | 0.19 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 34 | 0.19 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 34 | 0.19 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 44 | 0.19 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 44 | 0.19 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 3 | 0.19 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 12 | 0.19 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 14 | 0.19 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 39 | 0.19 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 39 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.19 |
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,715) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.19 |
| (1,710) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD21 | 39 | 0.19 |
| (1,710) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD22 | 39 | 0.19 |
| (1,710) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD23 | 39 | 0.19 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 45 | 0.19 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 24 | 0.19 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 24 | 0.19 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 37 | 0.19 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 37 | 0.19 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 1 | 0.19 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 39 | 0.19 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.19 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.19 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 16 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 14 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 14 | 0.19 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 14 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 1 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 2 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 3 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 6 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 7 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 8 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 11 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 13 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 16 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 17 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 20 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 21 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 23 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 26 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 29 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 30 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 32 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 33 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 34 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 39 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 41 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 43 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 45 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 46 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 48 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 49 | 0.19 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 50 | 0.19 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 2 | 0.19 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 6 | 0.19 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 7 | 0.19 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 8 | 0.19 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 11 | 0.19 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 16 | 0.19 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 17 | 0.19 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 22 | 0.19 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 26 | 0.19 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 27 | 0.19 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 32 | 0.19 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 34 | 0.19 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 43 | 0.19 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 45 | 0.19 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 49 | 0.19 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 50 | 0.19 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 12 | 0.19 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 28 | 0.19 |
| (1,653) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:14:ASN:H | 5 | 0.19 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 1 | 0.19 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 2 | 0.19 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 7 | 0.19 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 11 | 0.19 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 19 | 0.19 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 21 | 0.19 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 22 | 0.19 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 23 | 0.19 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 26 | 0.19 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 31 | 0.19 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 33 | 0.19 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 34 | 0.19 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 36 | 0.19 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 39 | 0.19 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 43 | 0.19 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 46 | 0.19 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 49 | 0.19 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 50 | 0.19 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 41 | 0.19 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 43 | 0.19 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 27 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,636) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 11 | 0.19 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 43 | 0.19 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 43 | 0.19 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 3 | 0.19 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 26 | 0.19 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 48 | 0.19 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 9 | 0.19 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 12 | 0.19 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 14 | 0.19 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 21 | 0.19 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 43 | 0.19 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 9 | 0.19 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 8 | 0.19 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 40 | 0.19 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 28 | 0.19 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 31 | 0.19 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 1 | 0.19 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 22 | 0.19 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 34 | 0.19 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 45 | 0.19 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 47 | 0.19 |
| (1,590) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 44 | 0.19 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 16 | 0.19 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 1 | 0.19 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 1 | 0.19 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG11 | 43 | 0.19 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG12 | 43 | 0.19 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG13 | 43 | 0.19 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 43 | 0.19 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 43 | 0.19 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 43 | 0.19 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 43 | 0.19 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 43 | 0.19 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 43 | 0.19 |
| (1,566) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 5 | 0.19 |
| (1,564) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 31 | 0.19 |
| (1,564) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 31 | 0.19 |
| (1,564) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 31 | 0.19 |
| (1,564) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 31 | 0.19 |
| (1,564) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 31 | 0.19 |
| (1,564) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 31 | 0.19 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 36 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 36 | 0.19 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 36 | 0.19 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 50 | 0.19 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 50 | 0.19 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 50 | 0.19 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 9 | 0.19 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 24 | 0.19 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 29 | 0.19 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 46 | 0.19 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 48 | 0.19 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 49 | 0.19 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 3 | 0.19 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 16 | 0.19 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 36 | 0.19 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 34 | 0.19 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 34 | 0.19 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 39 | 0.19 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 39 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 10 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 10 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 10 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 10 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 10 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 10 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 10 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 10 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 10 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 12 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 12 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 12 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 12 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 12 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 12 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 12 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 12 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 12 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 14 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 14 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 14 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 14 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 14 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 14 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 14 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 14 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 14 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 23 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 23 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 23 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 23 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 23 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 23 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 23 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 23 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 23 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 26 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 26 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 26 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 26 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 26 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 26 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 26 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 26 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 26 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 28 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 28 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 28 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 28 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 28 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 28 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 28 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 28 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 28 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 30 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 30 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 30 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 30 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 30 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 30 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 30 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 30 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 30 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 33 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 33 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 33 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 33 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 33 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 33 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 33 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 33 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 33 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 34 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 34 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 34 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 34 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 34 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 34 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 34 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 34 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 34 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 35 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 35 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 35 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 35 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 35 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 35 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 35 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 35 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 35 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 36 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 36 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 36 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 36 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 36 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 36 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 36 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 36 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 36 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 38 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 38 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 38 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 38 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 38 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 38 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 38 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 38 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 38 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 39 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 39 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 39 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 39 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 39 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 39 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 39 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 39 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 39 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 44 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 44 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 44 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 44 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 44 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 44 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 44 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 44 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 44 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 45 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 45 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 45 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 45 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 45 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 45 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 45 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 45 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 45 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 49 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 49 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 49 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 49 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 49 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 49 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 49 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 49 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 49 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.19 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.19 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 11 | 0.19 |
| (1,516) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG2 | 39 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 1 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 1 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 1 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 7 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 7 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 7 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 11 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 11 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 11 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 32 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 32 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 32 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 48 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 48 | 0.19 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 48 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 2 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 2 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 2 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 10 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 10 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 10 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 13 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 13 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 13 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 14 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 14 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 14 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 16 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 16 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 16 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 17 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 17 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 17 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 23 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 23 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 23 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 26 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 26 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 26 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 40 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 40 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 40 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 44 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 44 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 44 | 0.19 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 22 | 0.19 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 26 | 0.19 |
| (1,508) | 1:A:29:PRO:HB3 | 1:A:29:PRO:HG3 | 33 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 1 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 3 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 5 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 6 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 7 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 9 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 11 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 12 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 13 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 14 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 15 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 17 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 19 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 20 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 21 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 23 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 24 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 25 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 26 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 29 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 31 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 32 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 33 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 34 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 35 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 36 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 38 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 39 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 40 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 41 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 42 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 43 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 44 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 46 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 47 | 0.19 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 48 | 0.19 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 27 | 0.19 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 34 | 0.19 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 45 | 0.19 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 24 | 0.19 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 24 | 0.19 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 24 | 0.19 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 40 | 0.19 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 40 | 0.19 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 40 | 0.19 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HB3 | 14 | 0.19 |
| (1,39) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HB3 | 14 | 0.19 |
| (1,348) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 33 | 0.19 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 45 | 0.19 |
| (1,320) | 1:A:28:SER:H | 1:A:28:SER:HB3 | 5 | 0.19 |
| (1,320) | 1:A:28:SER:H | 1:A:28:SER:HB3 | 20 | 0.19 |
| (1,320) | 1:A:28:SER:H | 1:A:28:SER:HB3 | 21 | 0.19 |
| (1,320) | 1:A:28:SER:H | 1:A:28:SER:HB3 | 45 | 0.19 |
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 1 | 0.19 |
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 9 | 0.19 |
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 13 | 0.19 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 13 | 0.19 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 3 | 0.19 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 10 | 0.19 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 37 | 0.19 |
| (1,252) | 1:A:2:SER:H | 1:A:3:PRO:HG3 | 34 | 0.19 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 7 | 0.19 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 22 | 0.19 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 29 | 0.19 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 38 | 0.19 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 41 | 0.19 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 45 | 0.19 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 27 | 0.19 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 27 | 0.19 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 27 | 0.19 |
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:21:ASP:HA | 25 | 0.19 |
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:21:ASP:HA | 25 | 0.19 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 10 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 10 | 0.19 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 10 | 0.19 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 47 | 0.19 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 47 | 0.19 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 47 | 0.19 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.19 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.19 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.19 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 9 | 0.19 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 9 | 0.19 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 9 | 0.19 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 11 | 0.19 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 11 | 0.19 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 11 | 0.19 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 25 | 0.19 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 25 | 0.19 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 25 | 0.19 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 44 | 0.19 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 44 | 0.19 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 44 | 0.19 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 41 | 0.19 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 41 | 0.19 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 41 | 0.19 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 26 | 0.19 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 26 | 0.19 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 26 | 0.19 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 11 | 0.19 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 19 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 5 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 7 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 11 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 17 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 19 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 21 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 22 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 24 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 26 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 31 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 33 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 34 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 35 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 36 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 37 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 39 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 43 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 45 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 49 | 0.19 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 50 | 0.19 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 35 | 0.19 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 4 | 0.19 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 4 | 0.19 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 4 | 0.19 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 38 | 0.19 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 38 | 0.19 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 38 | 0.19 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 38 | 0.19 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 38 | 0.19 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 38 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 3 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 3 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 3 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 3 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 3 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 3 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 18 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 18 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 18 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 18 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 18 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 18 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 38 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 38 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 38 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 38 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 38 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 38 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 42 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 42 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 42 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 42 | 0.19 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 42 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 42 | 0.19 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 10 | 0.19 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 10 | 0.19 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 10 | 0.19 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 10 | 0.19 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 10 | 0.19 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 10 | 0.19 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 21 | 0.19 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 21 | 0.19 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 34 | 0.19 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 34 | 0.19 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 40 | 0.19 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 40 | 0.19 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 46 | 0.19 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 46 | 0.19 |
| (1,1027) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 4 | 0.19 |
| (1,1027) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 4 | 0.19 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 21 | 0.19 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 21 | 0.19 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 29 | 0.19 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 29 | 0.19 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 44 | 0.19 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 44 | 0.19 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 44 | 0.19 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 44 | 0.19 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 44 | 0.19 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 26 | 0.19 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 26 | 0.19 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 1 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 3 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 4 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 5 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 6 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 7 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 9 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 10 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 11 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 12 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 13 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 14 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 15 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 16 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 17 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 18 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 19 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 21 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 22 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 24 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 25 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 26 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 27 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 28 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 29 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 30 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 31 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 32 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 33 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 35 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 36 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 37 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 38 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 39 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 40 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 41 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 42 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 43 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 44 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 45 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 46 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 47 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 48 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 49 | 0.18 |
| (2,941) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 50 | 0.18 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 28 | 0.18 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 47 | 0.18 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 31 | 0.18 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 31 | 0.18 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 31 | 0.18 |
| (2,922) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:10:TYR:H | 18 | 0.18 |
| (2,922) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:10:TYR:H | 18 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,918) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:HA | 49 | 0.18 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 13 | 0.18 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 13 | 0.18 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 39 | 0.18 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 39 | 0.18 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 4 | 0.18 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.18 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.18 |
| (2,904) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 34 | 0.18 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 6 | 0.18 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 19 | 0.18 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 21 | 0.18 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 24 | 0.18 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 30 | 0.18 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 38 | 0.18 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 39 | 0.18 |
| (2,892) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 18 | 0.18 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 24 | 0.18 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 29 | 0.18 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 32 | 0.18 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 32 | 0.18 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 21 | 0.18 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 21 | 0.18 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 21 | 0.18 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 42 | 0.18 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 42 | 0.18 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 42 | 0.18 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 10 | 0.18 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 30 | 0.18 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 34 | 0.18 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 35 | 0.18 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 42 | 0.18 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 50 | 0.18 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 2 | 0.18 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 4 | 0.18 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 8 | 0.18 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 10 | 0.18 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 16 | 0.18 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 18 | 0.18 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 22 | 0.18 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 27 | 0.18 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 28 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 30 | 0.18 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 37 | 0.18 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 45 | 0.18 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 49 | 0.18 |
| (2,87) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 50 | 0.18 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 1 | 0.18 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 49 | 0.18 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 11 | 0.18 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 19 | 0.18 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 36 | 0.18 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 42 | 0.18 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 43 | 0.18 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 4 | 0.18 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 4 | 0.18 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 38 | 0.18 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 12 | 0.18 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 13 | 0.18 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 13 | 0.18 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 39 | 0.18 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 39 | 0.18 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 10 | 0.18 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 15 | 0.18 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 18 | 0.18 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 30 | 0.18 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 38 | 0.18 |
| (2,842) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 30 | 0.18 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 47 | 0.18 |
| (2,836) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 40 | 0.18 |
| (2,818) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 18 | 0.18 |
| (2,818) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 40 | 0.18 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 10 | 0.18 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 50 | 0.18 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 36 | 0.18 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 38 | 0.18 |
| (2,777) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:H | 40 | 0.18 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 9 | 0.18 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 28 | 0.18 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 40 | 0.18 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 40 | 0.18 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 48 | 0.18 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 48 | 0.18 |
| (2,76) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 2 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,76) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 38 | 0.18 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 20 | 0.18 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 35 | 0.18 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 36 | 0.18 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 9 | 0.18 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 11 | 0.18 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 43 | 0.18 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 43 | 0.18 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 30 | 0.18 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 19 | 0.18 |
| (2,702) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 16 | 0.18 |
| (2,7) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 6 | 0.18 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 4 | 0.18 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 9 | 0.18 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 10 | 0.18 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 12 | 0.18 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 14 | 0.18 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 15 | 0.18 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 18 | 0.18 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 25 | 0.18 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 27 | 0.18 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 28 | 0.18 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 38 | 0.18 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 40 | 0.18 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 42 | 0.18 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 44 | 0.18 |
| (2,686) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 47 | 0.18 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 1 | 0.18 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 13 | 0.18 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 19 | 0.18 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 21 | 0.18 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 31 | 0.18 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 33 | 0.18 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 35 | 0.18 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 36 | 0.18 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 39 | 0.18 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 40 | 0.18 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 46 | 0.18 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 33 | 0.18 |
| (2,675) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.18 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 5 | 0.18 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 24 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 35 | 0.18 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 22 | 0.18 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 22 | 0.18 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 22 | 0.18 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 39 | 0.18 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 39 | 0.18 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 39 | 0.18 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 1 | 0.18 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 26 | 0.18 |
| (2,655) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 2 | 0.18 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 46 | 0.18 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 50 | 0.18 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 1 | 0.18 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 2 | 0.18 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 7 | 0.18 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 24 | 0.18 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 29 | 0.18 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 40 | 0.18 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 48 | 0.18 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 50 | 0.18 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 2 | 0.18 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 8 | 0.18 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 38 | 0.18 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 5 | 0.18 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 22 | 0.18 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 24 | 0.18 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 26 | 0.18 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 33 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 1 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 1 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 1 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 2 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 2 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 2 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 4 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 4 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 4 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 5 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 5 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 5 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 8 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 8 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 8 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 9 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 9 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 9 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 11 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 11 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 11 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 12 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 12 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 12 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 13 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 13 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 13 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 15 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 15 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 15 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 16 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 16 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 16 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 17 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 17 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 17 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 19 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 19 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 19 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 20 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 20 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 20 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 21 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 21 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 21 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 23 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 23 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 23 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 26 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 26 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 26 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 28 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 28 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 28 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 29 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 29 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 29 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 30 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 30 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 30 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 31 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 31 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 31 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 32 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 32 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 32 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 33 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 33 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 33 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 34 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 34 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 34 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 35 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 35 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 35 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 37 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 37 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 37 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 39 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 39 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 39 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 40 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 40 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 40 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 41 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 41 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 41 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 42 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 42 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 42 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 43 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 43 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 43 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 44 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 44 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 44 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 47 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 47 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 47 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 49 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 49 | 0.18 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 49 | 0.18 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 26 | 0.18 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 27 | 0.18 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 8 | 0.18 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 10 | 0.18 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 20 | 0.18 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 26 | 0.18 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 36 | 0.18 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 43 | 0.18 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 15 | 0.18 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 15 | 0.18 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 40 | 0.18 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 40 | 0.18 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 31 | 0.18 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 31 | 0.18 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 31 | 0.18 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 7 | 0.18 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 7 | 0.18 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 7 | 0.18 |
| (2,571) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:HA | 13 | 0.18 |
| (2,570) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 24 | 0.18 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 22 | 0.18 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 22 | 0.18 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 22 | 0.18 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 39 | 0.18 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 39 | 0.18 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 39 | 0.18 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 8 | 0.18 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 12 | 0.18 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 16 | 0.18 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 19 | 0.18 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 21 | 0.18 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 26 | 0.18 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 28 | 0.18 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 32 | 0.18 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 41 | 0.18 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 42 | 0.18 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 50 | 0.18 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 10 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,550) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 6 | 0.18 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 15 | 0.18 |
| (2,549) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 15 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 1 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 1 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 1 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 1 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 1 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 1 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 1 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 1 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 1 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 3 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 3 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 3 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 3 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 3 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 3 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 3 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 3 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 3 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 4 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 4 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 4 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 4 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 4 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 4 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 4 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 4 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 4 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 6 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 6 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 6 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 6 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 6 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 6 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 6 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 6 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 6 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 8 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 8 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 8 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 8 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 8 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 8 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 8 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 8 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 8 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 9 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 9 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 9 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 9 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 9 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 9 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 9 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 9 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 9 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 11 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 11 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 11 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 11 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 11 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 11 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 11 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 11 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 11 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 15 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 15 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 15 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 15 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 15 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 15 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 15 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 15 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 15 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 16 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 16 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 16 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 16 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 16 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 16 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 16 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 16 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 16 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 17 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 17 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 17 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 17 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 17 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 17 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 17 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 17 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 17 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 19 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 19 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 19 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 19 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 19 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 19 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 19 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 19 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 19 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 20 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 20 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 20 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 20 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 20 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 20 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 20 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 20 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 20 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 21 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 21 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 21 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 21 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 21 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 21 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 21 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 21 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 21 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 22 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 22 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 22 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 22 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 22 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 22 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 22 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 22 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 22 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 25 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 25 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 25 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 25 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 25 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 25 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 25 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 25 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 25 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 27 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 27 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 27 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 27 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 27 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 27 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 27 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 27 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 27 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 29 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 29 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 29 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 29 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 29 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 29 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 29 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 29 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 29 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 32 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 32 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 32 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 32 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 32 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 32 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 32 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 32 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 32 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 41 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 41 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 41 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 41 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 41 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 41 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 41 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 41 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 41 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 42 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 42 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 42 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 42 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 42 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 42 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 42 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 42 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 42 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 43 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 43 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 43 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 43 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 43 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 43 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 43 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 43 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 43 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 46 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 46 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 46 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 46 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 46 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 46 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 46 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 46 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 46 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 48 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 48 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 48 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 48 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 48 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 48 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 48 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 48 | 0.18 |
| (2,543) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 48 | 0.18 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 1 | 0.18 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 42 | 0.18 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 5 | 0.18 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 5 | 0.18 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 43 | 0.18 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 43 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 3 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 3 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 3 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 8 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 8 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 8 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 13 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 13 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 13 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 14 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 14 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 14 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 16 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 16 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 16 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 17 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 17 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 17 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 26 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 26 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 26 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 35 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 35 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 35 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 36 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 36 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 36 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 38 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 38 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 38 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 40 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 40 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 40 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 44 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 44 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 44 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 47 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 47 | 0.18 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 47 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 1 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 1 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 1 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 6 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 6 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 6 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 8 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 8 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 8 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 24 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 24 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 24 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 31 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 31 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 31 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 36 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 36 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 36 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 47 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 47 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 47 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 48 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 48 | 0.18 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 48 | 0.18 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 24 | 0.18 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 24 | 0.18 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 2 | 0.18 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 4 | 0.18 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 8 | 0.18 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 10 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 16 | 0.18 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 18 | 0.18 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 22 | 0.18 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 27 | 0.18 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 28 | 0.18 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 30 | 0.18 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 37 | 0.18 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 45 | 0.18 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 49 | 0.18 |
| (2,484) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 50 | 0.18 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 33 | 0.18 |
| (2,48) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:H | 40 | 0.18 |
| (2,476) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 2 | 0.18 |
| (2,476) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 38 | 0.18 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 6 | 0.18 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 19 | 0.18 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 21 | 0.18 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 24 | 0.18 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 30 | 0.18 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 38 | 0.18 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 39 | 0.18 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 43 | 0.18 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 43 | 0.18 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 5 | 0.18 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 5 | 0.18 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 4 | 0.18 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 43 | 0.18 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 43 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 1 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 3 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 4 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 5 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 6 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 7 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 9 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 10 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 11 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 12 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 13 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 14 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 15 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 16 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 17 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 18 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 19 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 21 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 22 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 24 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 25 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 26 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 27 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 28 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 29 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 30 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 31 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 32 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 33 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 35 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 36 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 37 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 38 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 39 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 40 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 41 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 42 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 43 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 44 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 45 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 46 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 47 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 48 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 49 | 0.18 |
| (2,454) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 50 | 0.18 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.18 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.18 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 46 | 0.18 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 50 | 0.18 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 1 | 0.18 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 2 | 0.18 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 7 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 24 | 0.18 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 29 | 0.18 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 40 | 0.18 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 48 | 0.18 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 50 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 1 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 1 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 1 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 2 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 2 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 2 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 4 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 4 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 4 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 5 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 5 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 5 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 8 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 8 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 8 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 9 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 9 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 9 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 11 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 11 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 11 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 12 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 12 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 12 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 13 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 13 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 13 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 15 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 15 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 15 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 16 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 16 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 16 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 17 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 17 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 17 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 19 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 19 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 19 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 20 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 20 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 20 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 21 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 21 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 21 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 23 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 23 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 23 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 26 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 26 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 26 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 28 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 28 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 28 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 29 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 29 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 29 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 30 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 30 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 30 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 31 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 31 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 31 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 32 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 32 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 32 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 33 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 33 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 33 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 34 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 34 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 34 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 35 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 35 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 35 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 37 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 37 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 37 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 39 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 39 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 39 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 40 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 40 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 40 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 41 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 41 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 41 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 42 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 42 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 42 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 43 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 43 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 43 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 44 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 44 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 44 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 47 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 47 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 47 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 49 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 49 | 0.18 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 49 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 3 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 3 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 3 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 8 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 8 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 8 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 13 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 13 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 13 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 14 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 14 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 14 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 16 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 16 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 16 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 17 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 17 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 17 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 26 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 26 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 26 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 35 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 35 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 35 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 36 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 36 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 36 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 38 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 38 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 38 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 40 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 40 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 40 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 44 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 44 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 44 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 47 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 47 | 0.18 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 47 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 1 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 1 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 1 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 6 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 6 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 6 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 8 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 8 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 8 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 24 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 24 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 24 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 31 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 31 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 31 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 36 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 36 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 36 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 47 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 47 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 47 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 48 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 48 | 0.18 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 48 | 0.18 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 4 | 0.18 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 9 | 0.18 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 10 | 0.18 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 12 | 0.18 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 14 | 0.18 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 15 | 0.18 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 18 | 0.18 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 25 | 0.18 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 27 | 0.18 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 28 | 0.18 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 38 | 0.18 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 40 | 0.18 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 42 | 0.18 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 44 | 0.18 |
| (2,411) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 47 | 0.18 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 1 | 0.18 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 13 | 0.18 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 19 | 0.18 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 21 | 0.18 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 31 | 0.18 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 33 | 0.18 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 35 | 0.18 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 36 | 0.18 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 39 | 0.18 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 40 | 0.18 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 46 | 0.18 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 5 | 0.18 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 24 | 0.18 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 35 | 0.18 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 5 | 0.18 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 22 | 0.18 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 24 | 0.18 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 26 | 0.18 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 33 | 0.18 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 10 | 0.18 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 15 | 0.18 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 18 | 0.18 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 30 | 0.18 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 38 | 0.18 |
| (2,390) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 16 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 19 | 0.18 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 36 | 0.18 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 38 | 0.18 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 40 | 0.18 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 40 | 0.18 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 48 | 0.18 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 48 | 0.18 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 30 | 0.18 |
| (2,341) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 30 | 0.18 |
| (2,33) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 18 | 0.18 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 24 | 0.18 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 29 | 0.18 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 12 | 0.18 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 38 | 0.18 |
| (2,321) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 40 | 0.18 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 50 | 0.18 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 1 | 0.18 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 49 | 0.18 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 4 | 0.18 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 4 | 0.18 |
| (2,3) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 18 | 0.18 |
| (2,3) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 40 | 0.18 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 32 | 0.18 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 32 | 0.18 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 2 | 0.18 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 8 | 0.18 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 38 | 0.18 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 21 | 0.18 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 21 | 0.18 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 21 | 0.18 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 42 | 0.18 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 42 | 0.18 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 42 | 0.18 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 8 | 0.18 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 12 | 0.18 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 16 | 0.18 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 19 | 0.18 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 21 | 0.18 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 26 | 0.18 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 28 | 0.18 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 32 | 0.18 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 41 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 42 | 0.18 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 50 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 1 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 1 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 1 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 1 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 1 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 1 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 1 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 1 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 1 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 3 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 3 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 3 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 3 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 3 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 3 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 3 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 3 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 3 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 4 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 4 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 4 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 4 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 4 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 4 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 4 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 4 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 4 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 6 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 6 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 6 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 6 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 6 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 6 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 6 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 6 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 6 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 8 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 8 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 8 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 8 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 8 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 8 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 8 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 8 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 8 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 9 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 9 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 9 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 9 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 9 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 9 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 9 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 9 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 9 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 11 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 11 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 11 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 11 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 11 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 11 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 11 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 11 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 11 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 15 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 15 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 15 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 15 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 15 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 15 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 15 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 15 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 15 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 16 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 16 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 16 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 16 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 16 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 16 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 16 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 16 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 16 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 17 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 17 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 17 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 17 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 17 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 17 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 17 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 17 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 17 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 19 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 19 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 19 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 19 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 19 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 19 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 19 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 19 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 19 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 20 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 20 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 20 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 20 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 20 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 20 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 20 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 20 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 20 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 21 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 21 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 21 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 21 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 21 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 21 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 21 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 21 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 21 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 22 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 22 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 22 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 22 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 22 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 22 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 22 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 22 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 22 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 25 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 25 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 25 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 25 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 25 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 25 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 25 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 25 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 25 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 27 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 27 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 27 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 27 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 27 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 27 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 27 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 27 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 27 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 29 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 29 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 29 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 29 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 29 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 29 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 29 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 29 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 29 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 32 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 32 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 32 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 32 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 32 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 32 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 32 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 32 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 32 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 41 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 41 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 41 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 41 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 41 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 41 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 41 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 41 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 41 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 42 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 42 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 42 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 42 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 42 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 42 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 42 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 42 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 42 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 43 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 43 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 43 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 43 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 43 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 43 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 43 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 43 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 43 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 46 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 46 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 46 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 46 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 46 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 46 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 46 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 46 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 46 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 48 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 48 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 48 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 48 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 48 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 48 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 48 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 48 | 0.18 |
| (2,240) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 48 | 0.18 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 47 | 0.18 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 1 | 0.18 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 42 | 0.18 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 11 | 0.18 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 19 | 0.18 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 36 | 0.18 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 42 | 0.18 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 43 | 0.18 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 15 | 0.18 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 15 | 0.18 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 40 | 0.18 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 40 | 0.18 |
| (2,198) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 2 | 0.18 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 10 | 0.18 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 30 | 0.18 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 34 | 0.18 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 35 | 0.18 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 42 | 0.18 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 50 | 0.18 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 33 | 0.18 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 9 | 0.18 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 11 | 0.18 |
| (2,182) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:HA | 13 | 0.18 |
| (2,181) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 24 | 0.18 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 33 | 0.18 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 1 | 0.18 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 26 | 0.18 |
| (2,170) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:HA | 49 | 0.18 |
| (2,168) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 34 | 0.18 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 28 | 0.18 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 47 | 0.18 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 20 | 0.18 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 35 | 0.18 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 36 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 43 | 0.18 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 24 | 0.18 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 24 | 0.18 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 26 | 0.18 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 27 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:10:TYR:H | 18 | 0.18 |
| (2,138) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:10:TYR:H | 18 | 0.18 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 8 | 0.18 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 10 | 0.18 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 20 | 0.18 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 26 | 0.18 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 36 | 0.18 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 31 | 0.18 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 31 | 0.18 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 31 | 0.18 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 9 | 0.18 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 28 | 0.18 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 15 | 0.18 |
| (2,1) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 15 | 0.18 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:H | 5 | 0.18 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:H | 5 | 0.18 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:H | 44 | 0.18 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:H | 44 | 0.18 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 43 | 0.18 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 43 | 0.18 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 5 | 0.18 |
| (1,993) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 5 | 0.18 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 9 | 0.18 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 9 | 0.18 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 45 | 0.18 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 45 | 0.18 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2 | 16 | 0.18 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3 | 16 | 0.18 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2 | 46 | 0.18 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3 | 46 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 1 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 2 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 3 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 4 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 5 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 6 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 7 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 8 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 9 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 10 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 11 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 12 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 13 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 14 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 15 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 16 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 17 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 18 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 19 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 20 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 21 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 22 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 24 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 25 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 26 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 27 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 28 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 29 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 30 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 31 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 32 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 33 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 34 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 35 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 36 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 37 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 38 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 39 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 40 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 41 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 42 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 43 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 44 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 45 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 46 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 47 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 48 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 49 | 0.18 |
| (1,915) | 1:A:31:GLU:HG2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 50 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 28 | 0.18 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 47 | 0.18 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 31 | 0.18 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 31 | 0.18 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 31 | 0.18 |
| (1,896) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:10:TYR:H | 18 | 0.18 |
| (1,896) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:10:TYR:H | 18 | 0.18 |
| (1,892) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:HA | 49 | 0.18 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 13 | 0.18 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 13 | 0.18 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 39 | 0.18 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 39 | 0.18 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 4 | 0.18 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.18 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.18 |
| (1,878) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 34 | 0.18 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 6 | 0.18 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 19 | 0.18 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 21 | 0.18 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 24 | 0.18 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 30 | 0.18 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 38 | 0.18 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 39 | 0.18 |
| (1,866) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 18 | 0.18 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 24 | 0.18 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 29 | 0.18 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 32 | 0.18 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 32 | 0.18 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 21 | 0.18 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 21 | 0.18 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 21 | 0.18 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 42 | 0.18 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 42 | 0.18 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 42 | 0.18 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 10 | 0.18 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 30 | 0.18 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 34 | 0.18 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 35 | 0.18 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 42 | 0.18 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 50 | 0.18 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 1 | 0.18 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 49 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 11 | 0.18 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 19 | 0.18 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 36 | 0.18 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 42 | 0.18 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 43 | 0.18 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 4 | 0.18 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 4 | 0.18 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 38 | 0.18 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 12 | 0.18 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 10 | 0.18 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 15 | 0.18 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 18 | 0.18 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 30 | 0.18 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 38 | 0.18 |
| (1,816) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 30 | 0.18 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 47 | 0.18 |
| (1,810) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:23:CYS:H | 40 | 0.18 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 42 | 0.18 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 42 | 0.18 |
| (1,792) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 18 | 0.18 |
| (1,792) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 40 | 0.18 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 50 | 0.18 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 36 | 0.18 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 38 | 0.18 |
| (1,752) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:H | 40 | 0.18 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 9 | 0.18 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 28 | 0.18 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 40 | 0.18 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 40 | 0.18 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 48 | 0.18 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 48 | 0.18 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 20 | 0.18 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 35 | 0.18 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 36 | 0.18 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 9 | 0.18 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 11 | 0.18 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 43 | 0.18 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 43 | 0.18 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 30 | 0.18 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 19 | 0.18 |
| (1,678) | 1:A:28:SER:HB2 | 1:A:28:SER:H | 16 | 0.18 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 4 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 9 | 0.18 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 10 | 0.18 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 12 | 0.18 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 14 | 0.18 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 15 | 0.18 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 18 | 0.18 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 25 | 0.18 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 27 | 0.18 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 28 | 0.18 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 38 | 0.18 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 40 | 0.18 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 42 | 0.18 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 44 | 0.18 |
| (1,663) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HG2 | 47 | 0.18 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 1 | 0.18 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 13 | 0.18 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 19 | 0.18 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 21 | 0.18 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 31 | 0.18 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 33 | 0.18 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 35 | 0.18 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 36 | 0.18 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 39 | 0.18 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 40 | 0.18 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 46 | 0.18 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 33 | 0.18 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 5 | 0.18 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 24 | 0.18 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 35 | 0.18 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 1 | 0.18 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 26 | 0.18 |
| (1,636) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 2 | 0.18 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 46 | 0.18 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 50 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 1 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 2 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 7 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 24 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 29 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 40 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 48 | 0.18 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 50 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 2 | 0.18 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 8 | 0.18 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 38 | 0.18 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 5 | 0.18 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 22 | 0.18 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 24 | 0.18 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 26 | 0.18 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 33 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 1 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 1 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 1 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 2 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 2 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 2 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 4 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 4 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 4 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 5 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 5 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 5 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 8 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 8 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 8 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 9 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 9 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 9 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 11 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 11 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 11 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 12 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 12 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 12 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 13 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 13 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 13 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 15 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 15 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 15 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 16 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 16 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 16 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 17 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 17 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 17 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 19 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 19 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 19 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 20 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 20 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 20 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 21 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 21 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 21 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 23 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 23 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 23 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 26 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 26 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 26 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 28 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 28 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 28 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 29 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 29 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 29 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 30 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 30 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 30 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 31 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 31 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 31 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 32 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 32 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 32 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 33 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 33 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 33 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 34 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 34 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 34 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 35 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 35 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 35 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 37 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 37 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 37 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 39 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 39 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 39 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 40 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 40 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 40 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 41 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 41 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 41 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 42 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 42 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 42 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 43 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 43 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 43 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 44 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 44 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 44 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 47 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 47 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 47 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 49 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 49 | 0.18 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 49 | 0.18 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 26 | 0.18 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 27 | 0.18 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 8 | 0.18 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 10 | 0.18 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 20 | 0.18 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 26 | 0.18 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 36 | 0.18 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 43 | 0.18 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 15 | 0.18 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 15 | 0.18 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 40 | 0.18 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 40 | 0.18 |
| (1,560) | 1:A:13:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:HA | 13 | 0.18 |
| (1,559) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 24 | 0.18 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 22 | 0.18 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 22 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 22 | 0.18 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 39 | 0.18 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 39 | 0.18 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 39 | 0.18 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 8 | 0.18 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 12 | 0.18 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 16 | 0.18 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 19 | 0.18 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 21 | 0.18 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 26 | 0.18 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 28 | 0.18 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 32 | 0.18 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 41 | 0.18 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 42 | 0.18 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 50 | 0.18 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 10 | 0.18 |
| (1,540) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 6 | 0.18 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB2 | 15 | 0.18 |
| (1,539) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 15 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 1 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 1 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 1 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 1 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 1 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 1 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 1 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 1 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 1 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 3 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 3 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 3 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 3 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 3 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 3 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 3 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 3 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 3 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 4 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 4 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 4 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 4 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 4 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 4 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 4 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 4 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 4 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 6 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 6 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 6 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 6 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 6 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 6 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 6 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 6 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 6 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 8 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 8 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 8 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 8 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 8 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 8 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 8 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 8 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 8 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 9 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 9 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 9 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 9 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 9 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 9 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 9 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 9 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 9 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 11 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 11 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 11 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 11 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 11 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 11 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 11 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 11 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 11 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 15 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 15 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 15 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 15 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 15 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 15 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 15 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 15 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 15 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 16 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 16 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 16 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 16 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 16 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 16 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 16 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 16 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 16 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 17 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 17 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 17 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 17 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 17 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 17 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 17 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 17 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 17 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 19 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 19 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 19 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 19 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 19 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 19 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 19 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 19 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 19 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 20 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 20 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 20 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 20 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 20 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 20 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 20 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 20 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 20 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 21 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 21 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 21 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 21 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 21 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 21 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 21 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 21 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 21 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 22 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 22 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 22 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 22 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 22 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 22 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 22 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 22 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 22 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 25 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 25 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 25 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 25 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 25 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 25 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 25 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 25 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 25 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 27 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 27 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 27 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 27 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 27 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 27 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 27 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 27 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 27 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 29 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 29 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 29 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 29 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 29 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 29 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 29 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 29 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 29 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 32 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 32 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 32 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 32 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 32 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 32 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 32 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 32 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 32 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 41 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 41 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 41 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 41 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 41 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 41 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 41 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 41 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 41 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 42 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 42 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 42 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 42 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 42 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 42 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 42 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 42 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 42 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 43 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 43 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 43 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 43 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 43 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 43 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 43 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 43 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 43 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 46 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 46 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 46 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 46 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 46 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 46 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 46 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 46 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 46 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG21 | 48 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG22 | 48 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HG23 | 48 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG21 | 48 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG22 | 48 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HG23 | 48 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG21 | 48 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG22 | 48 | 0.18 |
| (1,533) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HG23 | 48 | 0.18 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 1 | 0.18 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 42 | 0.18 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 5 | 0.18 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 5 | 0.18 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 43 | 0.18 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 43 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 3 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 3 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 3 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 8 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 8 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 8 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 13 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 13 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 13 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 14 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 14 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 14 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 16 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 16 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 16 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 17 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 17 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 17 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 26 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 26 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 26 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 35 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 35 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 35 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 36 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 36 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 36 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 38 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 38 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 38 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 40 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 40 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 40 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 44 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 44 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 44 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 47 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 47 | 0.18 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 47 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 1 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 1 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 1 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 6 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 6 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 6 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 8 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 8 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 8 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 24 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 24 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 24 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 31 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 31 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 31 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 36 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 36 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 36 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 47 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 47 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 47 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 48 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 48 | 0.18 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 48 | 0.18 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 24 | 0.18 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 24 | 0.18 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 2 | 0.18 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 4 | 0.18 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 10 | 0.18 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 16 | 0.18 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 18 | 0.18 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 22 | 0.18 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 27 | 0.18 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 28 | 0.18 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 30 | 0.18 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 37 | 0.18 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 45 | 0.18 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 49 | 0.18 |
| (1,474) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:HB3 | 50 | 0.18 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 33 | 0.18 |
| (1,466) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 2 | 0.18 |
| (1,466) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 38 | 0.18 |
| (1,444) | 1:A:16:ASN:HD22 | 1:A:12:GLN:HB3 | 49 | 0.18 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 26 | 0.18 |
| (1,320) | 1:A:28:SER:H | 1:A:28:SER:HB3 | 33 | 0.18 |
| (1,320) | 1:A:28:SER:H | 1:A:28:SER:HB3 | 39 | 0.18 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 12 | 0.18 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 14 | 0.18 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 18 | 0.18 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 40 | 0.18 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 44 | 0.18 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 46 | 0.18 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 50 | 0.18 |
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 27 | 0.18 |
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 30 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 35 | 0.18 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 41 | 0.18 |
| (1,262) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 15 | 0.18 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 7 | 0.18 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 25 | 0.18 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 30 | 0.18 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 31 | 0.18 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 39 | 0.18 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 9 | 0.18 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 9 | 0.18 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 9 | 0.18 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 30 | 0.18 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 30 | 0.18 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 30 | 0.18 |
| (1,223) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:23:CYS:HB2 | 40 | 0.18 |
| (1,196) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:HA | 11 | 0.18 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 1 | 0.18 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 1 | 0.18 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 1 | 0.18 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 4 | 0.18 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 4 | 0.18 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 4 | 0.18 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 27 | 0.18 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 27 | 0.18 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 27 | 0.18 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 32 | 0.18 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 32 | 0.18 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 32 | 0.18 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 49 | 0.18 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 49 | 0.18 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 49 | 0.18 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 46 | 0.18 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 9 | 0.18 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 9 | 0.18 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 9 | 0.18 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 38 | 0.18 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 38 | 0.18 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 38 | 0.18 |
| (1,170) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 41 | 0.18 |
| (1,170) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 41 | 0.18 |
| (1,170) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 41 | 0.18 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 20 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 32 | 0.18 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 42 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 1 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 2 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 3 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 4 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 6 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 8 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 10 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 12 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 13 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 16 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 18 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 20 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 23 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 25 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 29 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 30 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 32 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 41 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 42 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 44 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 46 | 0.18 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 48 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 22 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 22 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 22 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 22 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 22 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 22 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 27 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 27 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 27 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 27 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 27 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 27 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 39 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 39 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 39 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 39 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 39 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 39 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 40 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 40 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 40 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 40 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 40 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 40 | 0.18 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 19 | 0.18 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 19 | 0.18 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 19 | 0.18 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 19 | 0.18 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 19 | 0.18 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 19 | 0.18 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 30 | 0.18 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 30 | 0.18 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 30 | 0.18 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 30 | 0.18 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 30 | 0.18 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 30 | 0.18 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 4 | 0.18 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 4 | 0.18 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 16 | 0.18 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 16 | 0.18 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 26 | 0.18 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 26 | 0.18 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 32 | 0.18 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 32 | 0.18 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 33 | 0.18 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 33 | 0.18 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 44 | 0.18 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 44 | 0.18 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 47 | 0.18 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 47 | 0.18 |
| (1,1027) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 49 | 0.18 |
| (1,1027) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 49 | 0.18 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HG2 | 1 | 0.18 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HG2 | 1 | 0.18 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HG2 | 1 | 0.18 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.18 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.18 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 1 | 0.18 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HG2 | 4 | 0.18 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HG2 | 4 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HG2 | 4 | 0.18 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.18 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.18 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 4 | 0.18 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 11 | 0.18 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 11 | 0.18 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 18 | 0.18 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 18 | 0.18 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 22 | 0.18 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 22 | 0.18 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 26 | 0.18 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 26 | 0.18 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 46 | 0.18 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 46 | 0.18 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 10 | 0.17 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 23 | 0.17 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 36 | 0.17 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 6 | 0.17 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 6 | 0.17 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 6 | 0.17 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 25 | 0.17 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 25 | 0.17 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 25 | 0.17 |
| (2,922) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:10:TYR:H | 15 | 0.17 |
| (2,922) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:10:TYR:H | 15 | 0.17 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 23 | 0.17 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 23 | 0.17 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 2 | 0.17 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 1 | 0.17 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 13 | 0.17 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 44 | 0.17 |
| (2,892) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 21 | 0.17 |
| (2,892) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 32 | 0.17 |
| (2,889) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:HA | 49 | 0.17 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 7 | 0.17 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 14 | 0.17 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 16 | 0.17 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 35 | 0.17 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 36 | 0.17 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 43 | 0.17 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 4 | 0.17 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 4 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 4 | 0.17 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 24 | 0.17 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 24 | 0.17 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 24 | 0.17 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 4 | 0.17 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 6 | 0.17 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 8 | 0.17 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 19 | 0.17 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 21 | 0.17 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 25 | 0.17 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 36 | 0.17 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 41 | 0.17 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 43 | 0.17 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 45 | 0.17 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 47 | 0.17 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 32 | 0.17 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 4 | 0.17 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 8 | 0.17 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 10 | 0.17 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 14 | 0.17 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 34 | 0.17 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 41 | 0.17 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 45 | 0.17 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 49 | 0.17 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 3 | 0.17 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 3 | 0.17 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 30 | 0.17 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 46 | 0.17 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 23 | 0.17 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 23 | 0.17 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 6 | 0.17 |
| (2,839) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 21 | 0.17 |
| (2,818) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 29 | 0.17 |
| (2,813) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H | 4 | 0.17 |
| (2,813) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H | 32 | 0.17 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 21 | 0.17 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 29 | 0.17 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 7 | 0.17 |
| (2,796) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 18 | 0.17 |
| (2,794) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 6 | 0.17 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 26 | 0.17 |
| (2,777) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:H | 11 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,767) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 21 | 0.17 |
| (2,767) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 21 | 0.17 |
| (2,765) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 29 | 0.17 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 4 | 0.17 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 11 | 0.17 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 26 | 0.17 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 50 | 0.17 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 22 | 0.17 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 34 | 0.17 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 38 | 0.17 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 43 | 0.17 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.17 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.17 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.17 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.17 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.17 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.17 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 6 | 0.17 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 6 | 0.17 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 6 | 0.17 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 31 | 0.17 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 31 | 0.17 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 31 | 0.17 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 5 | 0.17 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 23 | 0.17 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 24 | 0.17 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 21 | 0.17 |
| (2,673) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 37 | 0.17 |
| (2,667) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 29 | 0.17 |
| (2,667) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 48 | 0.17 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 4 | 0.17 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 49 | 0.17 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 49 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 22 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 38 | 0.17 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 43 | 0.17 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 16 | 0.17 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 17 | 0.17 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 36 | 0.17 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 11 | 0.17 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 11 | 0.17 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 11 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 28 | 0.17 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 28 | 0.17 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 28 | 0.17 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 17 | 0.17 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 18 | 0.17 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 19 | 0.17 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 35 | 0.17 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 49 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 3 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 3 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 3 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 6 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 6 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 6 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 7 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 7 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 7 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 10 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 10 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 10 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 14 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 14 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 14 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 18 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 18 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 18 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 22 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 22 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 22 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 24 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 24 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 24 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 25 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 25 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 25 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 27 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 27 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 27 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 36 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 36 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 36 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 38 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 38 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 38 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 45 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 45 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 45 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 46 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 46 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 46 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 48 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 48 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 48 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 50 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 50 | 0.17 |
| (2,628) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 50 | 0.17 |
| (2,622) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 5 | 0.17 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 2 | 0.17 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 9 | 0.17 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 31 | 0.17 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 34 | 0.17 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 44 | 0.17 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 49 | 0.17 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 21 | 0.17 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 33 | 0.17 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 29 | 0.17 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 9 | 0.17 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 9 | 0.17 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 32 | 0.17 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 32 | 0.17 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 46 | 0.17 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 46 | 0.17 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 13 | 0.17 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 13 | 0.17 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 11 | 0.17 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 11 | 0.17 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 11 | 0.17 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 28 | 0.17 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 28 | 0.17 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 28 | 0.17 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 2 | 0.17 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 3 | 0.17 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 10 | 0.17 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 14 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 20 | 0.17 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 27 | 0.17 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 36 | 0.17 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 39 | 0.17 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 11 | 0.17 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 49 | 0.17 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 21 | 0.17 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 29 | 0.17 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 15 | 0.17 |
| (2,537) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 25 | 0.17 |
| (2,537) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 50 | 0.17 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 2 | 0.17 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 2 | 0.17 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 2 | 0.17 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 20 | 0.17 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 20 | 0.17 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 20 | 0.17 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 22 | 0.17 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 22 | 0.17 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 22 | 0.17 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 23 | 0.17 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 23 | 0.17 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 23 | 0.17 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 31 | 0.17 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 31 | 0.17 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 31 | 0.17 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 7 | 0.17 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 7 | 0.17 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 7 | 0.17 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 11 | 0.17 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 11 | 0.17 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 11 | 0.17 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 29 | 0.17 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 29 | 0.17 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 29 | 0.17 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 32 | 0.17 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 32 | 0.17 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 32 | 0.17 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 34 | 0.17 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 34 | 0.17 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 34 | 0.17 |
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 6 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 7 | 0.17 |
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 12 | 0.17 |
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 21 | 0.17 |
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 34 | 0.17 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 38 | 0.17 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 38 | 0.17 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 22 | 0.17 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 48 | 0.17 |
| (2,48) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:H | 11 | 0.17 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 11 | 0.17 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 49 | 0.17 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 1 | 0.17 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 13 | 0.17 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 44 | 0.17 |
| (2,461) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 6 | 0.17 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 2 | 0.17 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 22 | 0.17 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 38 | 0.17 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 43 | 0.17 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.17 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.17 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.17 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.17 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.17 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.17 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 16 | 0.17 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 17 | 0.17 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 36 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 3 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 3 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 3 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 6 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 6 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 6 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 7 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 7 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 7 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 10 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 10 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 10 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 14 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 14 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 14 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 18 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 18 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 18 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 22 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 22 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 22 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 24 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 24 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 24 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 25 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 25 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 25 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 27 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 27 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 27 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 36 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 36 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 36 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 38 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 38 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 38 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 45 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 45 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 45 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 46 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 46 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 46 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 48 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 48 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 48 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 50 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 50 | 0.17 |
| (2,427) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 50 | 0.17 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 2 | 0.17 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 2 | 0.17 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 2 | 0.17 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 20 | 0.17 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 20 | 0.17 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 20 | 0.17 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 22 | 0.17 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 22 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 22 | 0.17 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 23 | 0.17 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 23 | 0.17 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 23 | 0.17 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 31 | 0.17 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 31 | 0.17 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 31 | 0.17 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 7 | 0.17 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 7 | 0.17 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 7 | 0.17 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 11 | 0.17 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 11 | 0.17 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 11 | 0.17 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 29 | 0.17 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 29 | 0.17 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 29 | 0.17 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 32 | 0.17 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 32 | 0.17 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 32 | 0.17 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 34 | 0.17 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 34 | 0.17 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 34 | 0.17 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 5 | 0.17 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 23 | 0.17 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 24 | 0.17 |
| (2,406) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 37 | 0.17 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 19 | 0.17 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 35 | 0.17 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 49 | 0.17 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 6 | 0.17 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 43 | 0.17 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 49 | 0.17 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 49 | 0.17 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 26 | 0.17 |
| (2,358) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 29 | 0.17 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 6 | 0.17 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 7 | 0.17 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 12 | 0.17 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 21 | 0.17 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 34 | 0.17 |
| (2,344) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 29 | 0.17 |
| (2,344) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 48 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,33) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 21 | 0.17 |
| (2,33) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 32 | 0.17 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 6 | 0.17 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 6 | 0.17 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 6 | 0.17 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 31 | 0.17 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 31 | 0.17 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 31 | 0.17 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 7 | 0.17 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 14 | 0.17 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 16 | 0.17 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 35 | 0.17 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 36 | 0.17 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 43 | 0.17 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 30 | 0.17 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 46 | 0.17 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 7 | 0.17 |
| (2,320) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 18 | 0.17 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 32 | 0.17 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 3 | 0.17 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 3 | 0.17 |
| (2,3) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 29 | 0.17 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 17 | 0.17 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 18 | 0.17 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 4 | 0.17 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 4 | 0.17 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 4 | 0.17 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 24 | 0.17 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 24 | 0.17 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 24 | 0.17 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 2 | 0.17 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 3 | 0.17 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 10 | 0.17 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 14 | 0.17 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 20 | 0.17 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 27 | 0.17 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 36 | 0.17 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 39 | 0.17 |
| (2,237) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 21 | 0.17 |
| (2,234) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H | 4 | 0.17 |
| (2,234) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H | 32 | 0.17 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 15 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,226) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 25 | 0.17 |
| (2,226) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 50 | 0.17 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 4 | 0.17 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 8 | 0.17 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 10 | 0.17 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 14 | 0.17 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 34 | 0.17 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 41 | 0.17 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 45 | 0.17 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 49 | 0.17 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 9 | 0.17 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 9 | 0.17 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 32 | 0.17 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 32 | 0.17 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 46 | 0.17 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 46 | 0.17 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 4 | 0.17 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 6 | 0.17 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 8 | 0.17 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 19 | 0.17 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 21 | 0.17 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 25 | 0.17 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 36 | 0.17 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 41 | 0.17 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 43 | 0.17 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 45 | 0.17 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 47 | 0.17 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 22 | 0.17 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 48 | 0.17 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 22 | 0.17 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 34 | 0.17 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 38 | 0.17 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 21 | 0.17 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 4 | 0.17 |
| (2,167) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:HA | 49 | 0.17 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 10 | 0.17 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 23 | 0.17 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 36 | 0.17 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 4 | 0.17 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 11 | 0.17 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 26 | 0.17 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 50 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 29 | 0.17 |
| (2,149) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 21 | 0.17 |
| (2,149) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 21 | 0.17 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 13 | 0.17 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 13 | 0.17 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 38 | 0.17 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 38 | 0.17 |
| (2,141) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 5 | 0.17 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 2 | 0.17 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 9 | 0.17 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 31 | 0.17 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 34 | 0.17 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 44 | 0.17 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 49 | 0.17 |
| (2,138) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:10:TYR:H | 15 | 0.17 |
| (2,138) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:10:TYR:H | 15 | 0.17 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 21 | 0.17 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 33 | 0.17 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 6 | 0.17 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 6 | 0.17 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 6 | 0.17 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 25 | 0.17 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 25 | 0.17 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 25 | 0.17 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 15 | 0.17 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 15 | 0.17 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG3 | 34 | 0.17 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG2 | 34 | 0.17 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 42 | 0.17 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 42 | 0.17 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 47 | 0.17 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 47 | 0.17 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2 | 2 | 0.17 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3 | 2 | 0.17 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2 | 39 | 0.17 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3 | 39 | 0.17 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 10 | 0.17 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 23 | 0.17 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 36 | 0.17 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 6 | 0.17 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 6 | 0.17 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 6 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 25 | 0.17 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 25 | 0.17 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 25 | 0.17 |
| (1,896) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:10:TYR:H | 15 | 0.17 |
| (1,896) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:10:TYR:H | 15 | 0.17 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 23 | 0.17 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 23 | 0.17 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 2 | 0.17 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 1 | 0.17 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 13 | 0.17 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 44 | 0.17 |
| (1,866) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 21 | 0.17 |
| (1,866) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 32 | 0.17 |
| (1,863) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:HA | 49 | 0.17 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 7 | 0.17 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 14 | 0.17 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 16 | 0.17 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 35 | 0.17 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 36 | 0.17 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 43 | 0.17 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 4 | 0.17 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 4 | 0.17 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 4 | 0.17 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 24 | 0.17 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 24 | 0.17 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 24 | 0.17 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 4 | 0.17 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 6 | 0.17 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 8 | 0.17 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 19 | 0.17 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 21 | 0.17 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 25 | 0.17 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 36 | 0.17 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 41 | 0.17 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 43 | 0.17 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 45 | 0.17 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 47 | 0.17 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 32 | 0.17 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 4 | 0.17 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 8 | 0.17 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 10 | 0.17 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 14 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 34 | 0.17 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 41 | 0.17 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 45 | 0.17 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 49 | 0.17 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 3 | 0.17 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 3 | 0.17 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 30 | 0.17 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 46 | 0.17 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 6 | 0.17 |
| (1,813) | 1:A:18:VAL:H | 1:A:15:VAL:H | 21 | 0.17 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 34 | 0.17 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 34 | 0.17 |
| (1,792) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 29 | 0.17 |
| (1,788) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H | 4 | 0.17 |
| (1,788) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H | 32 | 0.17 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 7 | 0.17 |
| (1,771) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 18 | 0.17 |
| (1,769) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 6 | 0.17 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 26 | 0.17 |
| (1,752) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:H | 11 | 0.17 |
| (1,742) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 21 | 0.17 |
| (1,742) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 21 | 0.17 |
| (1,740) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 29 | 0.17 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 4 | 0.17 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 11 | 0.17 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 26 | 0.17 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 50 | 0.17 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 22 | 0.17 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 34 | 0.17 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 38 | 0.17 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 43 | 0.17 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.17 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.17 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.17 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.17 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.17 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.17 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 6 | 0.17 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 6 | 0.17 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 6 | 0.17 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 31 | 0.17 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 31 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 31 | 0.17 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 5 | 0.17 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 23 | 0.17 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 24 | 0.17 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 21 | 0.17 |
| (1,651) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HG2 | 37 | 0.17 |
| (1,647) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 29 | 0.17 |
| (1,647) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 48 | 0.17 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 4 | 0.17 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 49 | 0.17 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 49 | 0.17 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 22 | 0.17 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 38 | 0.17 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 43 | 0.17 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 16 | 0.17 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 17 | 0.17 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 36 | 0.17 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 17 | 0.17 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 18 | 0.17 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 19 | 0.17 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 35 | 0.17 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 49 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 3 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 3 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 3 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 6 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 6 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 6 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 7 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 7 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 7 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 10 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 10 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 10 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 14 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 14 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 14 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 18 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 18 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 18 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 22 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 22 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 22 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 24 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 24 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 24 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 25 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 25 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 25 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 27 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 27 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 27 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 36 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 36 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 36 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 38 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 38 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 38 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 45 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 45 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 45 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 46 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 46 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 46 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 48 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 48 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 48 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD21 | 50 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD22 | 50 | 0.17 |
| (1,610) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HD23 | 50 | 0.17 |
| (1,605) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 5 | 0.17 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 2 | 0.17 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 9 | 0.17 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 31 | 0.17 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 34 | 0.17 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 44 | 0.17 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 49 | 0.17 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 21 | 0.17 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 33 | 0.17 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 29 | 0.17 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 9 | 0.17 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 9 | 0.17 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 32 | 0.17 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 32 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 46 | 0.17 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 46 | 0.17 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 13 | 0.17 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 13 | 0.17 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 11 | 0.17 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 11 | 0.17 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 11 | 0.17 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 28 | 0.17 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 28 | 0.17 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 28 | 0.17 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 2 | 0.17 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 3 | 0.17 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 10 | 0.17 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 14 | 0.17 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 20 | 0.17 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 27 | 0.17 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 36 | 0.17 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 39 | 0.17 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 11 | 0.17 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 49 | 0.17 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 21 | 0.17 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 29 | 0.17 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 15 | 0.17 |
| (1,527) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 25 | 0.17 |
| (1,527) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 50 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 2 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 2 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 2 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 20 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 20 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 20 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 22 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 22 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 22 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 23 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 23 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 23 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 31 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 31 | 0.17 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 31 | 0.17 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 7 | 0.17 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 7 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 7 | 0.17 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 11 | 0.17 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 11 | 0.17 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 11 | 0.17 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 29 | 0.17 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 29 | 0.17 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 29 | 0.17 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 32 | 0.17 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 32 | 0.17 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 32 | 0.17 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 34 | 0.17 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 34 | 0.17 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 34 | 0.17 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 6 | 0.17 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 7 | 0.17 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 12 | 0.17 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 21 | 0.17 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 34 | 0.17 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 38 | 0.17 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 38 | 0.17 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 22 | 0.17 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 48 | 0.17 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 11 | 0.17 |
| (1,454) | 1:A:9:CYS:H | 1:A:8:TYR:HB2 | 14 | 0.17 |
| (1,451) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:15:VAL:HG22 | 32 | 0.17 |
| (1,451) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:15:VAL:HG21 | 32 | 0.17 |
| (1,451) | 1:A:12:GLN:HE21 | 1:A:15:VAL:HG23 | 32 | 0.17 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 37 | 0.17 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 37 | 0.17 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 37 | 0.17 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 20 | 0.17 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 20 | 0.17 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 20 | 0.17 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 29 | 0.17 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 29 | 0.17 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 29 | 0.17 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 45 | 0.17 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 45 | 0.17 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 45 | 0.17 |
| (1,348) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 21 | 0.17 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 13 | 0.17 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 36 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,320) | 1:A:28:SER:H | 1:A:28:SER:HB3 | 19 | 0.17 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 5 | 0.17 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 9 | 0.17 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 11 | 0.17 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 17 | 0.17 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 25 | 0.17 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 31 | 0.17 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 38 | 0.17 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 41 | 0.17 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 17 | 0.17 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 6 | 0.17 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 30 | 0.17 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 21 | 0.17 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 21 | 0.17 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 21 | 0.17 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 34 | 0.17 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 34 | 0.17 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 34 | 0.17 |
| (1,229) | 1:A:25:GLN:H | 1:A:24:TYR:HB2 | 6 | 0.17 |
| (1,196) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:HA | 5 | 0.17 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 6 | 0.17 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 6 | 0.17 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 6 | 0.17 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 12 | 0.17 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 12 | 0.17 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 12 | 0.17 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 18 | 0.17 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 18 | 0.17 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 18 | 0.17 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 21 | 0.17 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 21 | 0.17 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 21 | 0.17 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 47 | 0.17 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 47 | 0.17 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 47 | 0.17 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 2 | 0.17 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 6 | 0.17 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 22 | 0.17 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 29 | 0.17 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 34 | 0.17 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 36 | 0.17 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 50 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 21 | 0.17 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 21 | 0.17 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 21 | 0.17 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 33 | 0.17 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 33 | 0.17 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 33 | 0.17 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 40 | 0.17 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 6 | 0.17 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 44 | 0.17 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 9 | 0.17 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 14 | 0.17 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 15 | 0.17 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 27 | 0.17 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 28 | 0.17 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 38 | 0.17 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 40 | 0.17 |
| (1,15) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HB2 | 47 | 0.17 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 22 | 0.17 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 24 | 0.17 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 4 | 0.17 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 10 | 0.17 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 12 | 0.17 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 14 | 0.17 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 15 | 0.17 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 25 | 0.17 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 28 | 0.17 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 41 | 0.17 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 44 | 0.17 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 47 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 2 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 2 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 2 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 2 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 2 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 2 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 10 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 10 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 10 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 10 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 10 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 10 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 25 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 25 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 25 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 25 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 25 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 25 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 30 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 30 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 30 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 30 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 30 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 30 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 31 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 31 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 31 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 31 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 31 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 31 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 47 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 47 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 47 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 47 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 47 | 0.17 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 47 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 6 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 6 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 6 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 6 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 11 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 11 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 11 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 11 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 16 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 16 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 16 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 16 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 20 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 20 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 20 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 20 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 28 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 28 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 28 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 28 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 35 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 35 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 35 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 35 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 41 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 41 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 41 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 41 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 43 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 43 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 43 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 43 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 44 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 44 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 44 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 44 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 50 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 50 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 50 | 0.17 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 50 | 0.17 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 27 | 0.17 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 27 | 0.17 |
| (1,1027) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 5 | 0.17 |
| (1,1027) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 5 | 0.17 |
| (1,1027) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HG | 39 | 0.17 |
| (1,1027) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 39 | 0.17 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 33 | 0.17 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 33 | 0.17 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 11 | 0.17 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 11 | 0.17 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 11 | 0.17 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 17 | 0.17 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 17 | 0.17 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 17 | 0.17 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 19 | 0.17 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 19 | 0.17 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 19 | 0.17 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 34 | 0.17 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 34 | 0.17 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 34 | 0.17 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 35 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 35 | 0.17 |
| (1,1016) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 35 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 8 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 8 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 9 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 9 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 13 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 13 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 14 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 14 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 17 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 17 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 23 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 23 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 28 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 28 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 29 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 29 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 33 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 33 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 35 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 35 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 40 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 40 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 41 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 41 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 45 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 45 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 49 | 0.17 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 49 | 0.17 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 7 | 0.17 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 7 | 0.17 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 14 | 0.17 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 14 | 0.17 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 16 | 0.17 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 16 | 0.17 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 18 | 0.17 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 18 | 0.17 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 41 | 0.17 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 41 | 0.17 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 47 | 0.17 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 47 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 11 | 0.16 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 35 | 0.16 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 39 | 0.16 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 44 | 0.16 |
| (2,922) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:10:TYR:H | 30 | 0.16 |
| (2,922) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:10:TYR:H | 30 | 0.16 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 5 | 0.16 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 5 | 0.16 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 20 | 0.16 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 20 | 0.16 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 24 | 0.16 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 24 | 0.16 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 33 | 0.16 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 33 | 0.16 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 43 | 0.16 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 43 | 0.16 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 47 | 0.16 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 47 | 0.16 |
| (2,905) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.16 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 12 | 0.16 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 27 | 0.16 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 14 | 0.16 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 36 | 0.16 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 38 | 0.16 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 42 | 0.16 |
| (2,892) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 1 | 0.16 |
| (2,892) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 37 | 0.16 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 1 | 0.16 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 33 | 0.16 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 34 | 0.16 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 49 | 0.16 |
| (2,881) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 37 | 0.16 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 4 | 0.16 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 5 | 0.16 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 11 | 0.16 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 24 | 0.16 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 1 | 0.16 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 1 | 0.16 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 41 | 0.16 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 41 | 0.16 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 26 | 0.16 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 26 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 26 | 0.16 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 37 | 0.16 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 37 | 0.16 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 37 | 0.16 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 16 | 0.16 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 17 | 0.16 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 27 | 0.16 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 44 | 0.16 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 11 | 0.16 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 27 | 0.16 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 30 | 0.16 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 6 | 0.16 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 9 | 0.16 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 15 | 0.16 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 16 | 0.16 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 22 | 0.16 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 26 | 0.16 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 30 | 0.16 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 33 | 0.16 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 35 | 0.16 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 38 | 0.16 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 39 | 0.16 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 46 | 0.16 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 47 | 0.16 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 5 | 0.16 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 5 | 0.16 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 7 | 0.16 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 7 | 0.16 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 8 | 0.16 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 8 | 0.16 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 14 | 0.16 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 14 | 0.16 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 31 | 0.16 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 31 | 0.16 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 43 | 0.16 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 43 | 0.16 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 50 | 0.16 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 50 | 0.16 |
| (2,861) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 43 | 0.16 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 13 | 0.16 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 20 | 0.16 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 5 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 5 | 0.16 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 20 | 0.16 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 20 | 0.16 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 24 | 0.16 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 24 | 0.16 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 33 | 0.16 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 33 | 0.16 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 43 | 0.16 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 43 | 0.16 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 47 | 0.16 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 47 | 0.16 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 48 | 0.16 |
| (2,842) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 5 | 0.16 |
| (2,818) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 3 | 0.16 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 44 | 0.16 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 31 | 0.16 |
| (2,767) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 33 | 0.16 |
| (2,767) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 33 | 0.16 |
| (2,76) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 4 | 0.16 |
| (2,76) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 30 | 0.16 |
| (2,76) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 49 | 0.16 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 17 | 0.16 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 37 | 0.16 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 45 | 0.16 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 48 | 0.16 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 42 | 0.16 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 21 | 0.16 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 23 | 0.16 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 26 | 0.16 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 44 | 0.16 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 41 | 0.16 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 41 | 0.16 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 21 | 0.16 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 32 | 0.16 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 36 | 0.16 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 38 | 0.16 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 50 | 0.16 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.16 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.16 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.16 |
| (2,689) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 1 | 0.16 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 21 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 21 | 0.16 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 21 | 0.16 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 36 | 0.16 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 18 | 0.16 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 18 | 0.16 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 18 | 0.16 |
| (2,667) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 26 | 0.16 |
| (2,667) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.16 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 3 | 0.16 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 35 | 0.16 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 47 | 0.16 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 40 | 0.16 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 40 | 0.16 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 40 | 0.16 |
| (2,658) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 14 | 0.16 |
| (2,655) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 14 | 0.16 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 44 | 0.16 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 44 | 0.16 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 2 | 0.16 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 3 | 0.16 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 10 | 0.16 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 19 | 0.16 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 29 | 0.16 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 31 | 0.16 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 34 | 0.16 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 36 | 0.16 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 39 | 0.16 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 6 | 0.16 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 12 | 0.16 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 38 | 0.16 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 46 | 0.16 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 47 | 0.16 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 11 | 0.16 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 19 | 0.16 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 27 | 0.16 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 11 | 0.16 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 31 | 0.16 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 24 | 0.16 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 27 | 0.16 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 45 | 0.16 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 8 | 0.16 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 8 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 17 | 0.16 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 17 | 0.16 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 18 | 0.16 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 18 | 0.16 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 44 | 0.16 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 44 | 0.16 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 18 | 0.16 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 18 | 0.16 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 18 | 0.16 |
| (2,570) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 31 | 0.16 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 18 | 0.16 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 18 | 0.16 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 18 | 0.16 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 4 | 0.16 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 6 | 0.16 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 23 | 0.16 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 30 | 0.16 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 35 | 0.16 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 43 | 0.16 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 9 | 0.16 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 31 | 0.16 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 27 | 0.16 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 44 | 0.16 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 16 | 0.16 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 45 | 0.16 |
| (2,537) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 17 | 0.16 |
| (2,537) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 35 | 0.16 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 6 | 0.16 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 6 | 0.16 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 10 | 0.16 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 10 | 0.16 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 45 | 0.16 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 45 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 9 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 9 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 9 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 10 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 10 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 10 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 27 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 27 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 27 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 33 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 33 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 33 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 50 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 50 | 0.16 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 50 | 0.16 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 15 | 0.16 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 15 | 0.16 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 15 | 0.16 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 19 | 0.16 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 19 | 0.16 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 19 | 0.16 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 21 | 0.16 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 21 | 0.16 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 21 | 0.16 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 28 | 0.16 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 28 | 0.16 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 28 | 0.16 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 46 | 0.16 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 46 | 0.16 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 46 | 0.16 |
| (2,501) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 22 | 0.16 |
| (2,501) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 22 | 0.16 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 18 | 0.16 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 18 | 0.16 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 1 | 0.16 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 2 | 0.16 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 9 | 0.16 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 15 | 0.16 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 26 | 0.16 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 29 | 0.16 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 32 | 0.16 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 38 | 0.16 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 46 | 0.16 |
| (2,476) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 4 | 0.16 |
| (2,476) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 30 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,476) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 49 | 0.16 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 9 | 0.16 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 31 | 0.16 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 12 | 0.16 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 27 | 0.16 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 41 | 0.16 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 41 | 0.16 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 6 | 0.16 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 6 | 0.16 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 10 | 0.16 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 10 | 0.16 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 45 | 0.16 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 45 | 0.16 |
| (2,451) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.16 |
| (2,45) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 43 | 0.16 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 2 | 0.16 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.16 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.16 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.16 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 42 | 0.16 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 3 | 0.16 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 10 | 0.16 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 19 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 9 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 9 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 9 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 10 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 10 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 10 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 27 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 27 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 27 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 33 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 33 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 33 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 50 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 50 | 0.16 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 50 | 0.16 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 15 | 0.16 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 15 | 0.16 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 15 | 0.16 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 19 | 0.16 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 19 | 0.16 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 19 | 0.16 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 21 | 0.16 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 21 | 0.16 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 21 | 0.16 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 28 | 0.16 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 28 | 0.16 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 28 | 0.16 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 46 | 0.16 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 46 | 0.16 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 46 | 0.16 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 31 | 0.16 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 34 | 0.16 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 36 | 0.16 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 39 | 0.16 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 48 | 0.16 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 32 | 0.16 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 36 | 0.16 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 38 | 0.16 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 50 | 0.16 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 44 | 0.16 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 44 | 0.16 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 31 | 0.16 |
| (2,349) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 22 | 0.16 |
| (2,349) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 22 | 0.16 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 21 | 0.16 |
| (2,344) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 26 | 0.16 |
| (2,344) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.16 |
| (2,341) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 5 | 0.16 |
| (2,33) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 1 | 0.16 |
| (2,33) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 37 | 0.16 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 21 | 0.16 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 21 | 0.16 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 21 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 1 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 33 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 34 | 0.16 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 49 | 0.16 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 13 | 0.16 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 20 | 0.16 |
| (2,314) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 37 | 0.16 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 11 | 0.16 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 27 | 0.16 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 30 | 0.16 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 5 | 0.16 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 5 | 0.16 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 7 | 0.16 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 7 | 0.16 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 8 | 0.16 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 8 | 0.16 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 14 | 0.16 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 14 | 0.16 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 31 | 0.16 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 31 | 0.16 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 43 | 0.16 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 43 | 0.16 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 50 | 0.16 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 50 | 0.16 |
| (2,3) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 3 | 0.16 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 1 | 0.16 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 1 | 0.16 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 41 | 0.16 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 41 | 0.16 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 11 | 0.16 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 19 | 0.16 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 27 | 0.16 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 29 | 0.16 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 4 | 0.16 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 5 | 0.16 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 11 | 0.16 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 24 | 0.16 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 27 | 0.16 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 26 | 0.16 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 26 | 0.16 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 26 | 0.16 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 37 | 0.16 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 37 | 0.16 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 37 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 4 | 0.16 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 6 | 0.16 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 23 | 0.16 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 30 | 0.16 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 35 | 0.16 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 43 | 0.16 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 16 | 0.16 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 45 | 0.16 |
| (2,226) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 17 | 0.16 |
| (2,226) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 35 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 6 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 9 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 15 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 16 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 22 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 26 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 30 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 33 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 35 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 38 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 39 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 46 | 0.16 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 47 | 0.16 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 8 | 0.16 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 8 | 0.16 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 17 | 0.16 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 17 | 0.16 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 18 | 0.16 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 18 | 0.16 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 44 | 0.16 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 44 | 0.16 |
| (2,198) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 14 | 0.16 |
| (2,196) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 1 | 0.16 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 16 | 0.16 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 17 | 0.16 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 27 | 0.16 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 44 | 0.16 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 1 | 0.16 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 2 | 0.16 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 9 | 0.16 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 15 | 0.16 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 26 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 29 | 0.16 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 32 | 0.16 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 38 | 0.16 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 46 | 0.16 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 21 | 0.16 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 23 | 0.16 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 26 | 0.16 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 44 | 0.16 |
| (2,181) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 31 | 0.16 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 14 | 0.16 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 36 | 0.16 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 38 | 0.16 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 42 | 0.16 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 36 | 0.16 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 3 | 0.16 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 35 | 0.16 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 47 | 0.16 |
| (2,172) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 14 | 0.16 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 11 | 0.16 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 35 | 0.16 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 39 | 0.16 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 44 | 0.16 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 17 | 0.16 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 37 | 0.16 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 45 | 0.16 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 48 | 0.16 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 24 | 0.16 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 27 | 0.16 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 45 | 0.16 |
| (2,149) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 33 | 0.16 |
| (2,149) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 33 | 0.16 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 18 | 0.16 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 18 | 0.16 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 6 | 0.16 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 12 | 0.16 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 38 | 0.16 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 46 | 0.16 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 47 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:10:TYR:H | 30 | 0.16 |
| (2,138) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:10:TYR:H | 30 | 0.16 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 11 | 0.16 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 31 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:H | 22 | 0.16 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:H | 22 | 0.16 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 2 | 0.16 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 2 | 0.16 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 27 | 0.16 |
| (1,997) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 27 | 0.16 |
| (1,996) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 30 | 0.16 |
| (1,996) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 30 | 0.16 |
| (1,956) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 4 | 0.16 |
| (1,956) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 4 | 0.16 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 20 | 0.16 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 20 | 0.16 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 32 | 0.16 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 32 | 0.16 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 39 | 0.16 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 39 | 0.16 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 44 | 0.16 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 44 | 0.16 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 49 | 0.16 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 49 | 0.16 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2 | 43 | 0.16 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3 | 43 | 0.16 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 11 | 0.16 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 35 | 0.16 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 39 | 0.16 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 44 | 0.16 |
| (1,896) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:10:TYR:H | 30 | 0.16 |
| (1,896) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:10:TYR:H | 30 | 0.16 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 5 | 0.16 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 5 | 0.16 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 20 | 0.16 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 20 | 0.16 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 24 | 0.16 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 24 | 0.16 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 33 | 0.16 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 33 | 0.16 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 43 | 0.16 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 43 | 0.16 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 47 | 0.16 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 47 | 0.16 |
| (1,879) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 12 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 27 | 0.16 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 14 | 0.16 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 36 | 0.16 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 38 | 0.16 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 42 | 0.16 |
| (1,866) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 1 | 0.16 |
| (1,866) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 37 | 0.16 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 1 | 0.16 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 33 | 0.16 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 34 | 0.16 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 49 | 0.16 |
| (1,855) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 37 | 0.16 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 4 | 0.16 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 5 | 0.16 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 11 | 0.16 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 24 | 0.16 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 1 | 0.16 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 1 | 0.16 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 41 | 0.16 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 41 | 0.16 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 26 | 0.16 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 26 | 0.16 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 26 | 0.16 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 37 | 0.16 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 37 | 0.16 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 37 | 0.16 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 16 | 0.16 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 17 | 0.16 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 27 | 0.16 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 44 | 0.16 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 11 | 0.16 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 27 | 0.16 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 30 | 0.16 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 6 | 0.16 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 9 | 0.16 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 15 | 0.16 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 16 | 0.16 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 22 | 0.16 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 26 | 0.16 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 30 | 0.16 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 33 | 0.16 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 35 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 38 | 0.16 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 39 | 0.16 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 46 | 0.16 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 47 | 0.16 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 5 | 0.16 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 5 | 0.16 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 7 | 0.16 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 7 | 0.16 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 8 | 0.16 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 8 | 0.16 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 14 | 0.16 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 14 | 0.16 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 31 | 0.16 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 31 | 0.16 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 43 | 0.16 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 43 | 0.16 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 50 | 0.16 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 50 | 0.16 |
| (1,835) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 43 | 0.16 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 13 | 0.16 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 20 | 0.16 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 48 | 0.16 |
| (1,816) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 5 | 0.16 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 37 | 0.16 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 37 | 0.16 |
| (1,792) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 3 | 0.16 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 31 | 0.16 |
| (1,742) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 33 | 0.16 |
| (1,742) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 33 | 0.16 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 17 | 0.16 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 37 | 0.16 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 45 | 0.16 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 48 | 0.16 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 42 | 0.16 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 21 | 0.16 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 23 | 0.16 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 26 | 0.16 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 44 | 0.16 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 41 | 0.16 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 41 | 0.16 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 21 | 0.16 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 32 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 36 | 0.16 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 38 | 0.16 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 50 | 0.16 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.16 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.16 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.16 |
| (1,666) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 1 | 0.16 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 21 | 0.16 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 21 | 0.16 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 21 | 0.16 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 36 | 0.16 |
| (1,647) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 26 | 0.16 |
| (1,647) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.16 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 3 | 0.16 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 35 | 0.16 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 47 | 0.16 |
| (1,639) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 14 | 0.16 |
| (1,636) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 14 | 0.16 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 44 | 0.16 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 44 | 0.16 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 2 | 0.16 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 3 | 0.16 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 10 | 0.16 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 19 | 0.16 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 29 | 0.16 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 31 | 0.16 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 34 | 0.16 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 36 | 0.16 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 39 | 0.16 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 6 | 0.16 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 12 | 0.16 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 38 | 0.16 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 46 | 0.16 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 47 | 0.16 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 11 | 0.16 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 19 | 0.16 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 27 | 0.16 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 11 | 0.16 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 31 | 0.16 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 24 | 0.16 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 27 | 0.16 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 45 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 8 | 0.16 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 8 | 0.16 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 17 | 0.16 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 17 | 0.16 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 18 | 0.16 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 18 | 0.16 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 44 | 0.16 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 44 | 0.16 |
| (1,559) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 31 | 0.16 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 18 | 0.16 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 18 | 0.16 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 18 | 0.16 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 4 | 0.16 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 6 | 0.16 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 23 | 0.16 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 30 | 0.16 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 35 | 0.16 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 43 | 0.16 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 9 | 0.16 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 31 | 0.16 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 27 | 0.16 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 44 | 0.16 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 16 | 0.16 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 45 | 0.16 |
| (1,527) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 17 | 0.16 |
| (1,527) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 35 | 0.16 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 6 | 0.16 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 6 | 0.16 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 10 | 0.16 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 10 | 0.16 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 45 | 0.16 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 45 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 9 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 9 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 9 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 10 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 10 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 10 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 27 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 27 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 27 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 33 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 33 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 33 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 50 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 50 | 0.16 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 50 | 0.16 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 15 | 0.16 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 15 | 0.16 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 15 | 0.16 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 19 | 0.16 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 19 | 0.16 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 19 | 0.16 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 21 | 0.16 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 21 | 0.16 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 21 | 0.16 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 28 | 0.16 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 28 | 0.16 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 28 | 0.16 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 46 | 0.16 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 46 | 0.16 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 46 | 0.16 |
| (1,491) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 22 | 0.16 |
| (1,491) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 22 | 0.16 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 18 | 0.16 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 18 | 0.16 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 1 | 0.16 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 2 | 0.16 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 9 | 0.16 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 15 | 0.16 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 26 | 0.16 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 29 | 0.16 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 32 | 0.16 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 38 | 0.16 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 46 | 0.16 |
| (1,466) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 4 | 0.16 |
| (1,466) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 30 | 0.16 |
| (1,466) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 49 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 5 | 0.16 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 5 | 0.16 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 5 | 0.16 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 31 | 0.16 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 31 | 0.16 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 31 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 4 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 4 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 4 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 8 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 8 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 8 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 9 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 9 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 9 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 15 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 15 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 15 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 16 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 16 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 16 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 19 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 19 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 19 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 21 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 21 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 21 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 33 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 33 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 33 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 39 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 39 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 39 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 41 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 41 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 41 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 43 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 43 | 0.16 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 43 | 0.16 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 19 | 0.16 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 19 | 0.16 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 48 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 48 | 0.16 |
| (1,348) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 7 | 0.16 |
| (1,296) | 1:A:8:TYR:H | 1:A:7:LYS:HB3 | 20 | 0.16 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 1 | 0.16 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 3 | 0.16 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 4 | 0.16 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 6 | 0.16 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 8 | 0.16 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 10 | 0.16 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 16 | 0.16 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 20 | 0.16 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 28 | 0.16 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 34 | 0.16 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 35 | 0.16 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 36 | 0.16 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 42 | 0.16 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 47 | 0.16 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 48 | 0.16 |
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 8 | 0.16 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 11 | 0.16 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 44 | 0.16 |
| (1,262) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 40 | 0.16 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 47 | 0.16 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 1 | 0.16 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 9 | 0.16 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 21 | 0.16 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 6 | 0.16 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 6 | 0.16 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 6 | 0.16 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 31 | 0.16 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 39 | 0.16 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 40 | 0.16 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 40 | 0.16 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 40 | 0.16 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG22 | 40 | 0.16 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG21 | 40 | 0.16 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG23 | 40 | 0.16 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 40 | 0.16 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 40 | 0.16 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 40 | 0.16 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 15 | 0.16 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 15 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 15 | 0.16 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 29 | 0.16 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 29 | 0.16 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 29 | 0.16 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 45 | 0.16 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 45 | 0.16 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 45 | 0.16 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 32 | 0.16 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 33 | 0.16 |
| (1,170) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 5 | 0.16 |
| (1,170) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 5 | 0.16 |
| (1,170) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 5 | 0.16 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 1 | 0.16 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 14 | 0.16 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 17 | 0.16 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 34 | 0.16 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 43 | 0.16 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 45 | 0.16 |
| (1,150) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 28 | 0.16 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 30 | 0.16 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 38 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 1 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 2 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 3 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 6 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 8 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 9 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 11 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 13 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 16 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 17 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 18 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 19 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 20 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 21 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 22 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 23 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 26 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 27 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 29 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 30 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 32 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 33 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 34 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 35 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 36 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 38 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 39 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 40 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 42 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 43 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 45 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 46 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 48 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 49 | 0.16 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 50 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 1 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 1 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 1 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 1 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 1 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 1 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 3 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 3 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 3 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 3 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 3 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 3 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 26 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 26 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 26 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 26 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 26 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 26 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 50 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 50 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 50 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 50 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 50 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 50 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 12 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 12 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 12 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 12 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 12 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 12 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 13 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 13 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 13 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 13 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 13 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 13 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 49 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 49 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 49 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 49 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 49 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 49 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 50 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 50 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 50 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 50 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 50 | 0.16 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 50 | 0.16 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HG2 | 28 | 0.16 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HG2 | 28 | 0.16 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HG2 | 28 | 0.16 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.16 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.16 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 28 | 0.16 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HG2 | 36 | 0.16 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HG2 | 36 | 0.16 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HG2 | 36 | 0.16 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.16 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.16 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 36 | 0.16 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 10 | 0.16 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 10 | 0.16 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:HA | 4 | 0.16 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:HA | 4 | 0.16 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 5 | 0.16 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 5 | 0.16 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB2 | 16 | 0.16 |
| (1,1014) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HB3 | 16 | 0.16 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 20 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 20 | 0.16 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 36 | 0.16 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 36 | 0.16 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 6 | 0.15 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 17 | 0.15 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 33 | 0.15 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 46 | 0.15 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 13 | 0.15 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 13 | 0.15 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 13 | 0.15 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 21 | 0.15 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 21 | 0.15 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 21 | 0.15 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 38 | 0.15 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 38 | 0.15 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 38 | 0.15 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 14 | 0.15 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 14 | 0.15 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 35 | 0.15 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 35 | 0.15 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 36 | 0.15 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 36 | 0.15 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 45 | 0.15 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 45 | 0.15 |
| (2,904) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 44 | 0.15 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 4 | 0.15 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 7 | 0.15 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 14 | 0.15 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 43 | 0.15 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 47 | 0.15 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 48 | 0.15 |
| (2,900) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:H | 18 | 0.15 |
| (2,900) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:H | 18 | 0.15 |
| (2,900) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:H | 18 | 0.15 |
| (2,900) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:H | 28 | 0.15 |
| (2,900) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:H | 28 | 0.15 |
| (2,900) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:H | 28 | 0.15 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 5 | 0.15 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 12 | 0.15 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 17 | 0.15 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 35 | 0.15 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 46 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 47 | 0.15 |
| (2,892) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 30 | 0.15 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 32 | 0.15 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 13 | 0.15 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 16 | 0.15 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 27 | 0.15 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 20 | 0.15 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 20 | 0.15 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 28 | 0.15 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 28 | 0.15 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 35 | 0.15 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 35 | 0.15 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 8 | 0.15 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 8 | 0.15 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 8 | 0.15 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 1 | 0.15 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 9 | 0.15 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 11 | 0.15 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 20 | 0.15 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 22 | 0.15 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 32 | 0.15 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 28 | 0.15 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 34 | 0.15 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 1 | 0.15 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 2 | 0.15 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 12 | 0.15 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 17 | 0.15 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 25 | 0.15 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 29 | 0.15 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 44 | 0.15 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 50 | 0.15 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 2 | 0.15 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 2 | 0.15 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 6 | 0.15 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 6 | 0.15 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 13 | 0.15 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 13 | 0.15 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 15 | 0.15 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 15 | 0.15 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 17 | 0.15 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 17 | 0.15 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 21 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 21 | 0.15 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 37 | 0.15 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 37 | 0.15 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 41 | 0.15 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 41 | 0.15 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 45 | 0.15 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 45 | 0.15 |
| (2,861) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 6 | 0.15 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 45 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 14 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 14 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 35 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 35 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 36 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 36 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 45 | 0.15 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 45 | 0.15 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 9 | 0.15 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 29 | 0.15 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 41 | 0.15 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 44 | 0.15 |
| (2,842) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 4 | 0.15 |
| (2,842) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 18 | 0.15 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 9 | 0.15 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 4 | 0.15 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 7 | 0.15 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 10 | 0.15 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 16 | 0.15 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 24 | 0.15 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 39 | 0.15 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 49 | 0.15 |
| (2,78) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 37 | 0.15 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 5 | 0.15 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 5 | 0.15 |
| (2,76) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 24 | 0.15 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 2 | 0.15 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 16 | 0.15 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 18 | 0.15 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 42 | 0.15 |
| (2,736) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:H | 48 | 0.15 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 30 | 0.15 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 2 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 2 | 0.15 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 29 | 0.15 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 29 | 0.15 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 48 | 0.15 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 48 | 0.15 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 8 | 0.15 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 33 | 0.15 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 46 | 0.15 |
| (2,717) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 22 | 0.15 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 7 | 0.15 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 21 | 0.15 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 24 | 0.15 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 25 | 0.15 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 27 | 0.15 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 34 | 0.15 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 47 | 0.15 |
| (2,703) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 35 | 0.15 |
| (2,7) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 40 | 0.15 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.15 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.15 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.15 |
| (2,689) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 27 | 0.15 |
| (2,689) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 32 | 0.15 |
| (2,688) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 38 | 0.15 |
| (2,685) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 37 | 0.15 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 8 | 0.15 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 29 | 0.15 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 45 | 0.15 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 24 | 0.15 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 24 | 0.15 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 24 | 0.15 |
| (2,667) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.15 |
| (2,667) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 16 | 0.15 |
| (2,667) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 49 | 0.15 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 8 | 0.15 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 20 | 0.15 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 48 | 0.15 |
| (2,655) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 40 | 0.15 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 1 | 0.15 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 1 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 17 | 0.15 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 49 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,65) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 12 | 0.15 |
| (2,65) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 12 | 0.15 |
| (2,65) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 12 | 0.15 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 18 | 0.15 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 22 | 0.15 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 38 | 0.15 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 44 | 0.15 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 18 | 0.15 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 18 | 0.15 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 18 | 0.15 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 46 | 0.15 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 46 | 0.15 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 46 | 0.15 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 1 | 0.15 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 7 | 0.15 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 21 | 0.15 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 43 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.15 |
| (2,618) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.15 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 14 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 32 | 0.15 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 42 | 0.15 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 45 | 0.15 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 13 | 0.15 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 6 | 0.15 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 9 | 0.15 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 40 | 0.15 |
| (2,607) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 12 | 0.15 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 7 | 0.15 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 28 | 0.15 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 32 | 0.15 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 2 | 0.15 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 2 | 0.15 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 16 | 0.15 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 16 | 0.15 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 30 | 0.15 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 30 | 0.15 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 35 | 0.15 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 35 | 0.15 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 42 | 0.15 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 42 | 0.15 |
| (2,595) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 4 | 0.15 |
| (2,595) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 6 | 0.15 |
| (2,595) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 9 | 0.15 |
| (2,595) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 20 | 0.15 |
| (2,595) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 30 | 0.15 |
| (2,595) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 38 | 0.15 |
| (2,588) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 28 | 0.15 |
| (2,588) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 28 | 0.15 |
| (2,588) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 28 | 0.15 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 23 | 0.15 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 23 | 0.15 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 23 | 0.15 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 24 | 0.15 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 24 | 0.15 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 24 | 0.15 |
| (2,579) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 37 | 0.15 |
| (2,579) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 37 | 0.15 |
| (2,579) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 37 | 0.15 |
| (2,579) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 37 | 0.15 |
| (2,579) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 37 | 0.15 |
| (2,579) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 37 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 48 | 0.15 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 48 | 0.15 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 48 | 0.15 |
| (2,570) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 7 | 0.15 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 24 | 0.15 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 24 | 0.15 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 24 | 0.15 |
| (2,564) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 12 | 0.15 |
| (2,564) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 12 | 0.15 |
| (2,564) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 12 | 0.15 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 18 | 0.15 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 18 | 0.15 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 18 | 0.15 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 46 | 0.15 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 46 | 0.15 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 46 | 0.15 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 33 | 0.15 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 40 | 0.15 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 47 | 0.15 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 26 | 0.15 |
| (2,555) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 7 | 0.15 |
| (2,555) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 37 | 0.15 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 4 | 0.15 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 11 | 0.15 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 19 | 0.15 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 34 | 0.15 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 40 | 0.15 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 9 | 0.15 |
| (2,550) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 40 | 0.15 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 3 | 0.15 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 12 | 0.15 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 31 | 0.15 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 36 | 0.15 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 46 | 0.15 |
| (2,537) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 26 | 0.15 |
| (2,537) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 27 | 0.15 |
| (2,537) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 30 | 0.15 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 8 | 0.15 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 8 | 0.15 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 23 | 0.15 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 23 | 0.15 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 34 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 34 | 0.15 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 4 | 0.15 |
| (2,531) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 4 | 0.15 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 12 | 0.15 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 12 | 0.15 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 12 | 0.15 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 43 | 0.15 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 43 | 0.15 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 43 | 0.15 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 45 | 0.15 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 45 | 0.15 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 45 | 0.15 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 0.15 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 0.15 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 0.15 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 25 | 0.15 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 25 | 0.15 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 25 | 0.15 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 41 | 0.15 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 41 | 0.15 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 41 | 0.15 |
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 17 | 0.15 |
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 35 | 0.15 |
| (2,508) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 43 | 0.15 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 16 | 0.15 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 20 | 0.15 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 21 | 0.15 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 25 | 0.15 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 27 | 0.15 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 39 | 0.15 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 41 | 0.15 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 43 | 0.15 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 44 | 0.15 |
| (2,478) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 37 | 0.15 |
| (2,476) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 24 | 0.15 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 26 | 0.15 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 4 | 0.15 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 7 | 0.15 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 14 | 0.15 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 43 | 0.15 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 47 | 0.15 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 48 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 2 | 0.15 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 2 | 0.15 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 29 | 0.15 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 29 | 0.15 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 48 | 0.15 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 48 | 0.15 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 8 | 0.15 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 8 | 0.15 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 23 | 0.15 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 23 | 0.15 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 34 | 0.15 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 34 | 0.15 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 4 | 0.15 |
| (2,459) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 4 | 0.15 |
| (2,45) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 6 | 0.15 |
| (2,445) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 35 | 0.15 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 17 | 0.15 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 49 | 0.15 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.15 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.15 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.15 |
| (2,436) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 12 | 0.15 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 18 | 0.15 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 22 | 0.15 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 38 | 0.15 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 44 | 0.15 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 12 | 0.15 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 12 | 0.15 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 12 | 0.15 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 43 | 0.15 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 43 | 0.15 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 43 | 0.15 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 45 | 0.15 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 45 | 0.15 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 45 | 0.15 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 0.15 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 0.15 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 0.15 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 25 | 0.15 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 25 | 0.15 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 25 | 0.15 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 41 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 41 | 0.15 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 41 | 0.15 |
| (2,410) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 37 | 0.15 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 1 | 0.15 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 7 | 0.15 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 21 | 0.15 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 43 | 0.15 |
| (2,40) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 22 | 0.15 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 9 | 0.15 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 29 | 0.15 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 41 | 0.15 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 44 | 0.15 |
| (2,395) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 38 | 0.15 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 7 | 0.15 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 21 | 0.15 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 24 | 0.15 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 25 | 0.15 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 27 | 0.15 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 34 | 0.15 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 47 | 0.15 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 1 | 0.15 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 1 | 0.15 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 4 | 0.15 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 7 | 0.15 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 10 | 0.15 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 16 | 0.15 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 24 | 0.15 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 39 | 0.15 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 49 | 0.15 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 5 | 0.15 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 5 | 0.15 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 17 | 0.15 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 35 | 0.15 |
| (2,355) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 43 | 0.15 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 8 | 0.15 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 33 | 0.15 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 46 | 0.15 |
| (2,344) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.15 |
| (2,344) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 16 | 0.15 |
| (2,344) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 49 | 0.15 |
| (2,341) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 4 | 0.15 |
| (2,341) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 18 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,33) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 30 | 0.15 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 32 | 0.15 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 45 | 0.15 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 28 | 0.15 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 34 | 0.15 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 2 | 0.15 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 2 | 0.15 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 6 | 0.15 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 6 | 0.15 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 13 | 0.15 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 13 | 0.15 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 15 | 0.15 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 15 | 0.15 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 17 | 0.15 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 17 | 0.15 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 21 | 0.15 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 21 | 0.15 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 37 | 0.15 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 37 | 0.15 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 41 | 0.15 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 41 | 0.15 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 45 | 0.15 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 45 | 0.15 |
| (2,300) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 37 | 0.15 |
| (2,300) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 37 | 0.15 |
| (2,300) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 37 | 0.15 |
| (2,300) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 37 | 0.15 |
| (2,300) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 37 | 0.15 |
| (2,300) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 37 | 0.15 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 20 | 0.15 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 20 | 0.15 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 28 | 0.15 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 28 | 0.15 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 35 | 0.15 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 35 | 0.15 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 13 | 0.15 |
| (2,286) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 7 | 0.15 |
| (2,286) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 37 | 0.15 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 13 | 0.15 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 16 | 0.15 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 27 | 0.15 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 4 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 11 | 0.15 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 19 | 0.15 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 34 | 0.15 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 40 | 0.15 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 8 | 0.15 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 8 | 0.15 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 8 | 0.15 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 33 | 0.15 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 40 | 0.15 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 47 | 0.15 |
| (2,246) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:H | 18 | 0.15 |
| (2,246) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:H | 18 | 0.15 |
| (2,246) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:H | 18 | 0.15 |
| (2,246) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:H | 28 | 0.15 |
| (2,246) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:H | 28 | 0.15 |
| (2,246) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:H | 28 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.15 |
| (2,241) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.15 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 3 | 0.15 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 12 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 31 | 0.15 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 36 | 0.15 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 46 | 0.15 |
| (2,226) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 26 | 0.15 |
| (2,226) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 27 | 0.15 |
| (2,226) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 30 | 0.15 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 1 | 0.15 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 2 | 0.15 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 12 | 0.15 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 17 | 0.15 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 25 | 0.15 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 29 | 0.15 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 44 | 0.15 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 50 | 0.15 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 2 | 0.15 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 2 | 0.15 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 16 | 0.15 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 16 | 0.15 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 30 | 0.15 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 30 | 0.15 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 35 | 0.15 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 35 | 0.15 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 42 | 0.15 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 42 | 0.15 |
| (2,219) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:H | 48 | 0.15 |
| (2,2) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 4 | 0.15 |
| (2,2) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 6 | 0.15 |
| (2,2) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 9 | 0.15 |
| (2,2) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 20 | 0.15 |
| (2,2) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 30 | 0.15 |
| (2,2) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 38 | 0.15 |
| (2,198) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 40 | 0.15 |
| (2,196) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 27 | 0.15 |
| (2,196) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 32 | 0.15 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 1 | 0.15 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 9 | 0.15 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 11 | 0.15 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 20 | 0.15 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 22 | 0.15 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 32 | 0.15 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 16 | 0.15 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 20 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 21 | 0.15 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 25 | 0.15 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 27 | 0.15 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 39 | 0.15 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 41 | 0.15 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 43 | 0.15 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 44 | 0.15 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 30 | 0.15 |
| (2,181) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 7 | 0.15 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 5 | 0.15 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 12 | 0.15 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 17 | 0.15 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 35 | 0.15 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 46 | 0.15 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 47 | 0.15 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 8 | 0.15 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 29 | 0.15 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 45 | 0.15 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 8 | 0.15 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 20 | 0.15 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 48 | 0.15 |
| (2,168) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 44 | 0.15 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 6 | 0.15 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 17 | 0.15 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 33 | 0.15 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 46 | 0.15 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 2 | 0.15 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 16 | 0.15 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 18 | 0.15 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 42 | 0.15 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 7 | 0.15 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 28 | 0.15 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 32 | 0.15 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 14 | 0.15 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 32 | 0.15 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 42 | 0.15 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 45 | 0.15 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 6 | 0.15 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 9 | 0.15 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 40 | 0.15 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 13 | 0.15 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 13 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 13 | 0.15 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 21 | 0.15 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 21 | 0.15 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 21 | 0.15 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 38 | 0.15 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 38 | 0.15 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 38 | 0.15 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG3 | 25 | 0.15 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG2 | 25 | 0.15 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 25 | 0.15 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 25 | 0.15 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG2 | 48 | 0.15 |
| (1,945) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HG3 | 48 | 0.15 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 6 | 0.15 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 17 | 0.15 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 33 | 0.15 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 46 | 0.15 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 13 | 0.15 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 13 | 0.15 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 13 | 0.15 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 21 | 0.15 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 21 | 0.15 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 21 | 0.15 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 38 | 0.15 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 38 | 0.15 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 38 | 0.15 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 14 | 0.15 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 14 | 0.15 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 35 | 0.15 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 35 | 0.15 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 36 | 0.15 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 36 | 0.15 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 45 | 0.15 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 45 | 0.15 |
| (1,878) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 44 | 0.15 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 4 | 0.15 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 7 | 0.15 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 14 | 0.15 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 43 | 0.15 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 47 | 0.15 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 48 | 0.15 |
| (1,874) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:H | 18 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,874) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:H | 18 | 0.15 |
| (1,874) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:H | 18 | 0.15 |
| (1,874) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:H | 28 | 0.15 |
| (1,874) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:H | 28 | 0.15 |
| (1,874) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:H | 28 | 0.15 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 5 | 0.15 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 12 | 0.15 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 17 | 0.15 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 35 | 0.15 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 46 | 0.15 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 47 | 0.15 |
| (1,866) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 30 | 0.15 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 32 | 0.15 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 13 | 0.15 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 16 | 0.15 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 27 | 0.15 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 20 | 0.15 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 20 | 0.15 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 28 | 0.15 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 28 | 0.15 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 35 | 0.15 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 35 | 0.15 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 8 | 0.15 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 8 | 0.15 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 8 | 0.15 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 1 | 0.15 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 11 | 0.15 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 20 | 0.15 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 22 | 0.15 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 32 | 0.15 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 28 | 0.15 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 34 | 0.15 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 1 | 0.15 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 2 | 0.15 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 12 | 0.15 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 17 | 0.15 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 25 | 0.15 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 29 | 0.15 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 44 | 0.15 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 50 | 0.15 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 2 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 2 | 0.15 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 6 | 0.15 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 6 | 0.15 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 13 | 0.15 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 13 | 0.15 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 15 | 0.15 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 15 | 0.15 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 17 | 0.15 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 17 | 0.15 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 21 | 0.15 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 21 | 0.15 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 37 | 0.15 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 37 | 0.15 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 41 | 0.15 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 41 | 0.15 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 45 | 0.15 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 45 | 0.15 |
| (1,835) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 6 | 0.15 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 45 | 0.15 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 9 | 0.15 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 29 | 0.15 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 41 | 0.15 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 44 | 0.15 |
| (1,816) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 4 | 0.15 |
| (1,816) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 18 | 0.15 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 9 | 0.15 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 9 | 0.15 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 14 | 0.15 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 14 | 0.15 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 38 | 0.15 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 38 | 0.15 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 40 | 0.15 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 40 | 0.15 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 47 | 0.15 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 47 | 0.15 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 4 | 0.15 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 7 | 0.15 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 10 | 0.15 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 16 | 0.15 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 24 | 0.15 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 39 | 0.15 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 49 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 5 | 0.15 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 5 | 0.15 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 2 | 0.15 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 16 | 0.15 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 18 | 0.15 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 42 | 0.15 |
| (1,712) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:H | 48 | 0.15 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 30 | 0.15 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 2 | 0.15 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 2 | 0.15 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 29 | 0.15 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 29 | 0.15 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 48 | 0.15 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 48 | 0.15 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 8 | 0.15 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 33 | 0.15 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 46 | 0.15 |
| (1,693) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 22 | 0.15 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 7 | 0.15 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 21 | 0.15 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 24 | 0.15 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 25 | 0.15 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 27 | 0.15 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 34 | 0.15 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 47 | 0.15 |
| (1,679) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 35 | 0.15 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.15 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.15 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 3 | 0.15 |
| (1,666) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 27 | 0.15 |
| (1,666) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 32 | 0.15 |
| (1,665) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 38 | 0.15 |
| (1,662) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:29:PRO:HB2 | 37 | 0.15 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 8 | 0.15 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 29 | 0.15 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 45 | 0.15 |
| (1,647) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.15 |
| (1,647) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 16 | 0.15 |
| (1,647) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 49 | 0.15 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 8 | 0.15 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 20 | 0.15 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 48 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,636) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 40 | 0.15 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 1 | 0.15 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 1 | 0.15 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 17 | 0.15 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 49 | 0.15 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 18 | 0.15 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 22 | 0.15 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 38 | 0.15 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 44 | 0.15 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 1 | 0.15 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 7 | 0.15 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 21 | 0.15 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 43 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 1 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 2 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 3 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 4 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 5 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 6 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 7 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 8 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 9 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 10 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 11 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 12 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 13 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 14 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 15 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 16 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 17 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 18 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 19 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 20 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 21 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 22 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 23 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 24 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 25 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 26 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 27 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 28 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 29 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 30 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 31 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 32 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 33 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 34 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 35 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 36 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 37 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 38 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 39 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 40 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 41 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 42 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 43 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 44 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 45 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 46 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 47 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 48 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 49 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.15 |
| (1,601) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:HB | 50 | 0.15 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 14 | 0.15 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 32 | 0.15 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 42 | 0.15 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 45 | 0.15 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 13 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 6 | 0.15 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 9 | 0.15 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 40 | 0.15 |
| (1,590) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 12 | 0.15 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 7 | 0.15 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 28 | 0.15 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 32 | 0.15 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 2 | 0.15 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 2 | 0.15 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 16 | 0.15 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 16 | 0.15 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 30 | 0.15 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 30 | 0.15 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 35 | 0.15 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 35 | 0.15 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 42 | 0.15 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 42 | 0.15 |
| (1,578) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 4 | 0.15 |
| (1,578) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 6 | 0.15 |
| (1,578) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,578) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 20 | 0.15 |
| (1,578) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 30 | 0.15 |
| (1,578) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 38 | 0.15 |
| (1,564) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 37 | 0.15 |
| (1,564) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 37 | 0.15 |
| (1,564) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 37 | 0.15 |
| (1,564) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 37 | 0.15 |
| (1,564) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 37 | 0.15 |
| (1,564) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 37 | 0.15 |
| (1,559) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 7 | 0.15 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 24 | 0.15 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 24 | 0.15 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 24 | 0.15 |
| (1,554) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 12 | 0.15 |
| (1,554) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 12 | 0.15 |
| (1,554) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 12 | 0.15 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 18 | 0.15 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 18 | 0.15 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 18 | 0.15 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 46 | 0.15 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 46 | 0.15 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 46 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 33 | 0.15 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 40 | 0.15 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 47 | 0.15 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 26 | 0.15 |
| (1,545) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 7 | 0.15 |
| (1,545) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 37 | 0.15 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 4 | 0.15 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 11 | 0.15 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 19 | 0.15 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 34 | 0.15 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 40 | 0.15 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 9 | 0.15 |
| (1,540) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 40 | 0.15 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 3 | 0.15 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 12 | 0.15 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 31 | 0.15 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 36 | 0.15 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 46 | 0.15 |
| (1,527) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 26 | 0.15 |
| (1,527) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 27 | 0.15 |
| (1,527) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 30 | 0.15 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 8 | 0.15 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 8 | 0.15 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 23 | 0.15 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 23 | 0.15 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 34 | 0.15 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 34 | 0.15 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD2 | 4 | 0.15 |
| (1,521) | 1:A:32:ARG:HA | 1:A:32:ARG:HD3 | 4 | 0.15 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 12 | 0.15 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 12 | 0.15 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 12 | 0.15 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 43 | 0.15 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 43 | 0.15 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 43 | 0.15 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 45 | 0.15 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 45 | 0.15 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 45 | 0.15 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 0.15 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 0.15 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 0.15 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 25 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 25 | 0.15 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 25 | 0.15 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 41 | 0.15 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 41 | 0.15 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 41 | 0.15 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 17 | 0.15 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 35 | 0.15 |
| (1,498) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG3 | 43 | 0.15 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 16 | 0.15 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 20 | 0.15 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 21 | 0.15 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 25 | 0.15 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 27 | 0.15 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 39 | 0.15 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 41 | 0.15 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 43 | 0.15 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 44 | 0.15 |
| (1,468) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 37 | 0.15 |
| (1,466) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 24 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 1 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 1 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 1 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 2 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 2 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 2 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 6 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 6 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 6 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 14 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 14 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 14 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 22 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 22 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 22 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 27 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 27 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 27 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 32 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 32 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 32 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 35 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 35 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 35 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 36 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 36 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 36 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 44 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 44 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 44 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 46 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 46 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 46 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 49 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 49 | 0.15 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 49 | 0.15 |
| (1,393) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 31 | 0.15 |
| (1,378) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 30 | 0.15 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 2 | 0.15 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 2 | 0.15 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 8 | 0.15 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 8 | 0.15 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 17 | 0.15 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 17 | 0.15 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 29 | 0.15 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 29 | 0.15 |
| (1,348) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 29 | 0.15 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 2 | 0.15 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 27 | 0.15 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 30 | 0.15 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 32 | 0.15 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 43 | 0.15 |
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 3 | 0.15 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 42 | 0.15 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 6 | 0.15 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 47 | 0.15 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 47 | 0.15 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 47 | 0.15 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 2 | 0.15 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 8 | 0.15 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 9 | 0.15 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 13 | 0.15 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 16 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 19 | 0.15 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 22 | 0.15 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 23 | 0.15 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 24 | 0.15 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 26 | 0.15 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 28 | 0.15 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 33 | 0.15 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 35 | 0.15 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 44 | 0.15 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 47 | 0.15 |
| (1,196) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:HA | 32 | 0.15 |
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:21:ASP:HA | 42 | 0.15 |
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:21:ASP:HA | 42 | 0.15 |
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:21:ASP:HA | 46 | 0.15 |
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:21:ASP:HA | 46 | 0.15 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 30 | 0.15 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 30 | 0.15 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 30 | 0.15 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 16 | 0.15 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 16 | 0.15 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 16 | 0.15 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 36 | 0.15 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 36 | 0.15 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 36 | 0.15 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 42 | 0.15 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 42 | 0.15 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 42 | 0.15 |
| (1,180) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:17:LYS:HA | 38 | 0.15 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 9 | 0.15 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 15 | 0.15 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 21 | 0.15 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 47 | 0.15 |
| (1,146) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 31 | 0.15 |
| (1,146) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 31 | 0.15 |
| (1,146) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 31 | 0.15 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 12 | 0.15 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 5 | 0.15 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 24 | 0.15 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 31 | 0.15 |
| (1,13) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:29:PRO:HB3 | 37 | 0.15 |
| (1,109) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HA | 37 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 6 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 6 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 6 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 6 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 6 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 6 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 7 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 7 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 7 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 7 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 12 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 12 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 20 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 20 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 20 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 20 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 20 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 20 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 21 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 21 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 21 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 21 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 21 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 21 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 41 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 41 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 41 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 41 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 41 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 41 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 42 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 42 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 42 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 42 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 42 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 42 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 48 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 48 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 48 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 48 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 48 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 48 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 49 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 49 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 49 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 49 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 49 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 49 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 5 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 5 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 5 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 5 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 10 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 10 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 17 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 17 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 18 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 18 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 18 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 18 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 19 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 19 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 19 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 19 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 25 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 25 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 25 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 25 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 27 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 27 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 27 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 27 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 30 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 30 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 30 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 30 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 31 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 31 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 31 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 31 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 34 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 34 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 34 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 34 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 39 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 39 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 39 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 39 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 47 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 47 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 47 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 47 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 48 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 48 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 48 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 48 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB2 | 49 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB2 | 49 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HB3 | 49 | 0.15 |
| (1,1046) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HB3 | 49 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 5 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 5 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 5 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 5 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 5 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 5 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 17 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 17 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 17 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 17 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 17 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 22 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 22 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 22 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 22 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 22 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 22 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 28 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 28 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 28 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 28 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 28 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 28 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 37 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 37 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 37 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 37 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 37 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 37 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 40 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 40 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 40 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 40 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 40 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 40 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 47 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 47 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 47 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 47 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 47 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 47 | 0.15 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 22 | 0.15 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 22 | 0.15 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 27 | 0.15 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 27 | 0.15 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 29 | 0.15 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 29 | 0.15 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 45 | 0.15 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 45 | 0.15 |
| (2,95) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 13 | 0.14 |
| (2,943) | 1:A:28:SER:HB3 | 1:A:28:SER:H | 16 | 0.14 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 40 | 0.14 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 16 | 0.14 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 16 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 21 | 0.14 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 21 | 0.14 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 26 | 0.14 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 26 | 0.14 |
| (2,913) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 34 | 0.14 |
| (2,909) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 13 | 0.14 |
| (2,904) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 2 | 0.14 |
| (2,904) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 12 | 0.14 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 11 | 0.14 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 26 | 0.14 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 29 | 0.14 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 35 | 0.14 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 41 | 0.14 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 42 | 0.14 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 50 | 0.14 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 6 | 0.14 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 8 | 0.14 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 25 | 0.14 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 50 | 0.14 |
| (2,892) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 36 | 0.14 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 26 | 0.14 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 38 | 0.14 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 39 | 0.14 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 1 | 0.14 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 8 | 0.14 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 34 | 0.14 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 18 | 0.14 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 18 | 0.14 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 18 | 0.14 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 32 | 0.14 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 32 | 0.14 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 32 | 0.14 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 2 | 0.14 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 15 | 0.14 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 26 | 0.14 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 29 | 0.14 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 39 | 0.14 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 40 | 0.14 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 46 | 0.14 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 6 | 0.14 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 23 | 0.14 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 44 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 46 | 0.14 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 20 | 0.14 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 27 | 0.14 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 28 | 0.14 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 32 | 0.14 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 48 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 9 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 9 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 10 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 10 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 12 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 12 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 20 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 20 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 22 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 22 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 24 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 24 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 28 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 28 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 29 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 29 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 35 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 35 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 36 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 36 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 39 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 39 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 40 | 0.14 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 40 | 0.14 |
| (2,863) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:32:ARG:H | 47 | 0.14 |
| (2,861) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 7 | 0.14 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 6 | 0.14 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 37 | 0.14 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 41 | 0.14 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 16 | 0.14 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 16 | 0.14 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 21 | 0.14 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 21 | 0.14 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 26 | 0.14 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 26 | 0.14 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 11 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 25 | 0.14 |
| (2,842) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 8 | 0.14 |
| (2,818) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 19 | 0.14 |
| (2,818) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 21 | 0.14 |
| (2,818) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 43 | 0.14 |
| (2,815) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 8 | 0.14 |
| (2,815) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 8 | 0.14 |
| (2,813) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H | 13 | 0.14 |
| (2,813) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H | 15 | 0.14 |
| (2,813) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H | 45 | 0.14 |
| (2,807) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 43 | 0.14 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 2 | 0.14 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 3 | 0.14 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 11 | 0.14 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 29 | 0.14 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 40 | 0.14 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 41 | 0.14 |
| (2,78) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 23 | 0.14 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 35 | 0.14 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 20 | 0.14 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 20 | 0.14 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 42 | 0.14 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 42 | 0.14 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 22 | 0.14 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 30 | 0.14 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 31 | 0.14 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 43 | 0.14 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 46 | 0.14 |
| (2,736) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:H | 6 | 0.14 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 10 | 0.14 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 24 | 0.14 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 41 | 0.14 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 1 | 0.14 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 32 | 0.14 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 39 | 0.14 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 41 | 0.14 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 45 | 0.14 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 10 | 0.14 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 37 | 0.14 |
| (2,703) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 32 | 0.14 |
| (2,7) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 32 | 0.14 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.14 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.14 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.14 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.14 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.14 |
| (2,688) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 9 | 0.14 |
| (2,688) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 15 | 0.14 |
| (2,688) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 25 | 0.14 |
| (2,688) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 40 | 0.14 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 33 | 0.14 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 33 | 0.14 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 33 | 0.14 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 7 | 0.14 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 19 | 0.14 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 22 | 0.14 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 26 | 0.14 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 44 | 0.14 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 45 | 0.14 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 45 | 0.14 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 45 | 0.14 |
| (2,667) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 14 | 0.14 |
| (2,667) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 22 | 0.14 |
| (2,667) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 47 | 0.14 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 5 | 0.14 |
| (2,655) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 15 | 0.14 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 17 | 0.14 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 17 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 4 | 0.14 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 29 | 0.14 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 27 | 0.14 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 27 | 0.14 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 27 | 0.14 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 19 | 0.14 |
| (2,639) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 48 | 0.14 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 17 | 0.14 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 20 | 0.14 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 41 | 0.14 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 44 | 0.14 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 45 | 0.14 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 50 | 0.14 |
| (2,622) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 40 | 0.14 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 4 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 13 | 0.14 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 29 | 0.14 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 33 | 0.14 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 37 | 0.14 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 50 | 0.14 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 50 | 0.14 |
| (2,609) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 12 | 0.14 |
| (2,609) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 23 | 0.14 |
| (2,609) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 48 | 0.14 |
| (2,607) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 47 | 0.14 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 5 | 0.14 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 5 | 0.14 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 20 | 0.14 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 20 | 0.14 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG11 | 8 | 0.14 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG12 | 8 | 0.14 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG13 | 8 | 0.14 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 8 | 0.14 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 8 | 0.14 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 8 | 0.14 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 8 | 0.14 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 8 | 0.14 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 8 | 0.14 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 12 | 0.14 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 12 | 0.14 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 5 | 0.14 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 5 | 0.14 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 5 | 0.14 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 13 | 0.14 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 13 | 0.14 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 13 | 0.14 |
| (2,570) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 28 | 0.14 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 45 | 0.14 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 45 | 0.14 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 45 | 0.14 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 27 | 0.14 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 27 | 0.14 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 27 | 0.14 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 1 | 0.14 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 15 | 0.14 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 44 | 0.14 |
| (2,558) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 45 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 6 | 0.14 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 19 | 0.14 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 20 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 1 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 3 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 5 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 6 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 7 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 9 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 13 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 14 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 15 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 16 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 17 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 20 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 21 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 23 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 24 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 26 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 29 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 31 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 33 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 35 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 36 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 37 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 39 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 41 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 42 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 43 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 45 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 46 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 47 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 48 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 49 | 0.14 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 50 | 0.14 |
| (2,550) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 32 | 0.14 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 34 | 0.14 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 49 | 0.14 |
| (2,537) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 41 | 0.14 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 40 | 0.14 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 40 | 0.14 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 49 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 49 | 0.14 |
| (2,507) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 5 | 0.14 |
| (2,507) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 20 | 0.14 |
| (2,507) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 28 | 0.14 |
| (2,496) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 19 | 0.14 |
| (2,496) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 29 | 0.14 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 34 | 0.14 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 34 | 0.14 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 4 | 0.14 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 6 | 0.14 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 10 | 0.14 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 11 | 0.14 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 17 | 0.14 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 30 | 0.14 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 36 | 0.14 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 42 | 0.14 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 45 | 0.14 |
| (2,478) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 23 | 0.14 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 6 | 0.14 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 19 | 0.14 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 20 | 0.14 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 11 | 0.14 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 26 | 0.14 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 29 | 0.14 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 35 | 0.14 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 41 | 0.14 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 42 | 0.14 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 50 | 0.14 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 40 | 0.14 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 40 | 0.14 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 49 | 0.14 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 49 | 0.14 |
| (2,463) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 34 | 0.14 |
| (2,455) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:32:ARG:H | 47 | 0.14 |
| (2,45) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 7 | 0.14 |
| (2,445) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 32 | 0.14 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 4 | 0.14 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 29 | 0.14 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.14 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.14 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.14 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.14 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.14 |
| (2,436) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 47 | 0.14 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 17 | 0.14 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 20 | 0.14 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 41 | 0.14 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 44 | 0.14 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 45 | 0.14 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 50 | 0.14 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 11 | 0.14 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 25 | 0.14 |
| (2,395) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 9 | 0.14 |
| (2,395) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 15 | 0.14 |
| (2,395) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 25 | 0.14 |
| (2,395) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 40 | 0.14 |
| (2,392) | 1:A:28:SER:HB3 | 1:A:28:SER:H | 16 | 0.14 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 10 | 0.14 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 37 | 0.14 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 17 | 0.14 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 17 | 0.14 |
| (2,377) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 43 | 0.14 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 2 | 0.14 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 3 | 0.14 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 11 | 0.14 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 29 | 0.14 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 40 | 0.14 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 41 | 0.14 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG11 | 8 | 0.14 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG12 | 8 | 0.14 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG13 | 8 | 0.14 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 8 | 0.14 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 8 | 0.14 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 8 | 0.14 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 8 | 0.14 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 8 | 0.14 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 8 | 0.14 |
| (2,36) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 12 | 0.14 |
| (2,36) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 23 | 0.14 |
| (2,36) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 48 | 0.14 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 20 | 0.14 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 20 | 0.14 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 42 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 42 | 0.14 |
| (2,354) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 5 | 0.14 |
| (2,354) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 20 | 0.14 |
| (2,354) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 28 | 0.14 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 1 | 0.14 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 32 | 0.14 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 39 | 0.14 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 41 | 0.14 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 45 | 0.14 |
| (2,344) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 14 | 0.14 |
| (2,344) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 22 | 0.14 |
| (2,344) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 47 | 0.14 |
| (2,341) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 8 | 0.14 |
| (2,33) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 36 | 0.14 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 33 | 0.14 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 33 | 0.14 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 33 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 26 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 38 | 0.14 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 39 | 0.14 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 6 | 0.14 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 37 | 0.14 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 41 | 0.14 |
| (2,312) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 8 | 0.14 |
| (2,312) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 8 | 0.14 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 6 | 0.14 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 23 | 0.14 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 44 | 0.14 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 46 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 9 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 9 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 10 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 10 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 12 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 12 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 20 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 20 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 22 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 22 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 24 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 24 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 28 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 28 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 29 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 29 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 35 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 35 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 36 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 36 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 39 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 39 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 40 | 0.14 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 40 | 0.14 |
| (2,3) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 19 | 0.14 |
| (2,3) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 21 | 0.14 |
| (2,3) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 43 | 0.14 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 50 | 0.14 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 19 | 0.14 |
| (2,274) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 48 | 0.14 |
| (2,271) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 19 | 0.14 |
| (2,271) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 29 | 0.14 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 1 | 0.14 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 8 | 0.14 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 34 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 1 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 3 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 5 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 6 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 7 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 9 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 13 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 14 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 15 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 16 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 17 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 20 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 21 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 23 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 24 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 26 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 29 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 31 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 33 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 35 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 36 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 37 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 39 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 41 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 42 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 43 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 45 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 46 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 47 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 48 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 49 | 0.14 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 50 | 0.14 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 18 | 0.14 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 18 | 0.14 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 18 | 0.14 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 32 | 0.14 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 32 | 0.14 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 32 | 0.14 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 1 | 0.14 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 15 | 0.14 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 44 | 0.14 |
| (2,248) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 45 | 0.14 |
| (2,234) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H | 13 | 0.14 |
| (2,234) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H | 15 | 0.14 |
| (2,234) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H | 45 | 0.14 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 34 | 0.14 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 49 | 0.14 |
| (2,226) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 41 | 0.14 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 20 | 0.14 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 27 | 0.14 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 28 | 0.14 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 32 | 0.14 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 48 | 0.14 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 5 | 0.14 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 5 | 0.14 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 20 | 0.14 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 20 | 0.14 |
| (2,219) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:H | 6 | 0.14 |
| (2,198) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 15 | 0.14 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 2 | 0.14 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 15 | 0.14 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 26 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 29 | 0.14 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 39 | 0.14 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 40 | 0.14 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 46 | 0.14 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 4 | 0.14 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 6 | 0.14 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 10 | 0.14 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 11 | 0.14 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 17 | 0.14 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 30 | 0.14 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 36 | 0.14 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 42 | 0.14 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 45 | 0.14 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 10 | 0.14 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 24 | 0.14 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 41 | 0.14 |
| (2,181) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 28 | 0.14 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 6 | 0.14 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 8 | 0.14 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 25 | 0.14 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 50 | 0.14 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 7 | 0.14 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 19 | 0.14 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 22 | 0.14 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 26 | 0.14 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 44 | 0.14 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 5 | 0.14 |
| (2,168) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 2 | 0.14 |
| (2,168) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 12 | 0.14 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 40 | 0.14 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 22 | 0.14 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 30 | 0.14 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 31 | 0.14 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 43 | 0.14 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 46 | 0.14 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 12 | 0.14 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 12 | 0.14 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 34 | 0.14 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 34 | 0.14 |
| (2,141) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 40 | 0.14 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 4 | 0.14 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 13 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 29 | 0.14 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 33 | 0.14 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 37 | 0.14 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 50 | 0.14 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 35 | 0.14 |
| (1,996) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 1 | 0.14 |
| (1,996) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 1 | 0.14 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 8 | 0.14 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 8 | 0.14 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 21 | 0.14 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 21 | 0.14 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 22 | 0.14 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 22 | 0.14 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 33 | 0.14 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 33 | 0.14 |
| (1,917) | 1:A:28:SER:HB3 | 1:A:28:SER:H | 16 | 0.14 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 40 | 0.14 |
| (1,89) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 29 | 0.14 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 16 | 0.14 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 16 | 0.14 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 21 | 0.14 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 21 | 0.14 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 26 | 0.14 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 26 | 0.14 |
| (1,887) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:HA | 34 | 0.14 |
| (1,883) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 13 | 0.14 |
| (1,878) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 2 | 0.14 |
| (1,878) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 12 | 0.14 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 11 | 0.14 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 26 | 0.14 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 29 | 0.14 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 35 | 0.14 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 41 | 0.14 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 42 | 0.14 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 50 | 0.14 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 6 | 0.14 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 8 | 0.14 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 25 | 0.14 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 50 | 0.14 |
| (1,866) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 36 | 0.14 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 26 | 0.14 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 38 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 39 | 0.14 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 1 | 0.14 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 8 | 0.14 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 34 | 0.14 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 18 | 0.14 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 18 | 0.14 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 32 | 0.14 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 32 | 0.14 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 32 | 0.14 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 2 | 0.14 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 15 | 0.14 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 26 | 0.14 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 29 | 0.14 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 39 | 0.14 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 40 | 0.14 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 46 | 0.14 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 6 | 0.14 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 23 | 0.14 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 44 | 0.14 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 46 | 0.14 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 20 | 0.14 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 27 | 0.14 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 28 | 0.14 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 32 | 0.14 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 48 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 9 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 9 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 10 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 10 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 12 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 12 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 20 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 20 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 22 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 22 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 24 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 24 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 28 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 28 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 29 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 29 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 35 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 35 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 36 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 36 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 39 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 39 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 40 | 0.14 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 40 | 0.14 |
| (1,837) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:32:ARG:H | 47 | 0.14 |
| (1,835) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 7 | 0.14 |
| (1,83) | 1:A:24:TYR:HE2 | 1:A:28:SER:HB2 | 19 | 0.14 |
| (1,83) | 1:A:24:TYR:HE1 | 1:A:28:SER:HB2 | 19 | 0.14 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 6 | 0.14 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 37 | 0.14 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 41 | 0.14 |
| (1,82) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB3 | 39 | 0.14 |
| (1,82) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB3 | 39 | 0.14 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 11 | 0.14 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 25 | 0.14 |
| (1,816) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 8 | 0.14 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 2 | 0.14 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 2 | 0.14 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:28:SER:HB2 | 27 | 0.14 |
| (1,81) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:28:SER:HB2 | 27 | 0.14 |
| (1,792) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 19 | 0.14 |
| (1,792) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 21 | 0.14 |
| (1,792) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 43 | 0.14 |
| (1,790) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 8 | 0.14 |
| (1,790) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 8 | 0.14 |
| (1,788) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H | 13 | 0.14 |
| (1,788) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H | 15 | 0.14 |
| (1,788) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:H | 45 | 0.14 |
| (1,782) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:27:CYS:H | 43 | 0.14 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 2 | 0.14 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 3 | 0.14 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 11 | 0.14 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 29 | 0.14 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 40 | 0.14 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 41 | 0.14 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 35 | 0.14 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 20 | 0.14 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 20 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 42 | 0.14 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 42 | 0.14 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 22 | 0.14 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 30 | 0.14 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 31 | 0.14 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 43 | 0.14 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 46 | 0.14 |
| (1,712) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:H | 6 | 0.14 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 10 | 0.14 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 24 | 0.14 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 41 | 0.14 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 1 | 0.14 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 32 | 0.14 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 39 | 0.14 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 41 | 0.14 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 45 | 0.14 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 10 | 0.14 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 37 | 0.14 |
| (1,679) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 32 | 0.14 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.14 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.14 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 17 | 0.14 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.14 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.14 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 41 | 0.14 |
| (1,665) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 9 | 0.14 |
| (1,665) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 15 | 0.14 |
| (1,665) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 25 | 0.14 |
| (1,665) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 40 | 0.14 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 33 | 0.14 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 33 | 0.14 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 33 | 0.14 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 7 | 0.14 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 19 | 0.14 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 22 | 0.14 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 26 | 0.14 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 44 | 0.14 |
| (1,647) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 14 | 0.14 |
| (1,647) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 22 | 0.14 |
| (1,647) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 47 | 0.14 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 5 | 0.14 |
| (1,636) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 15 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 17 | 0.14 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 17 | 0.14 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 4 | 0.14 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 29 | 0.14 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 19 | 0.14 |
| (1,620) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:H | 48 | 0.14 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 17 | 0.14 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 20 | 0.14 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 41 | 0.14 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 44 | 0.14 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 45 | 0.14 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 50 | 0.14 |
| (1,605) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 40 | 0.14 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 4 | 0.14 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 13 | 0.14 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 29 | 0.14 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 33 | 0.14 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 37 | 0.14 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 50 | 0.14 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 50 | 0.14 |
| (1,592) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 12 | 0.14 |
| (1,592) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 23 | 0.14 |
| (1,592) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 48 | 0.14 |
| (1,590) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 47 | 0.14 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 5 | 0.14 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 5 | 0.14 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 20 | 0.14 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 20 | 0.14 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG11 | 8 | 0.14 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG12 | 8 | 0.14 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG13 | 8 | 0.14 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 8 | 0.14 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 8 | 0.14 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 8 | 0.14 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 8 | 0.14 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 8 | 0.14 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 8 | 0.14 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 12 | 0.14 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 12 | 0.14 |
| (1,559) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 28 | 0.14 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 45 | 0.14 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 45 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 45 | 0.14 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 27 | 0.14 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 27 | 0.14 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 27 | 0.14 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 1 | 0.14 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 15 | 0.14 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 44 | 0.14 |
| (1,548) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HA | 45 | 0.14 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 6 | 0.14 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 19 | 0.14 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 20 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 1 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 3 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 5 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 6 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 7 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 9 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 13 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 14 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 15 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 16 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 17 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 20 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 21 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 23 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 24 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 26 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 29 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 31 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 33 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 35 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 36 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 37 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 39 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 41 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 42 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 43 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 45 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 46 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 47 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 48 | 0.14 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 49 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 50 | 0.14 |
| (1,540) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 32 | 0.14 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 34 | 0.14 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 49 | 0.14 |
| (1,527) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 41 | 0.14 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 40 | 0.14 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 40 | 0.14 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 49 | 0.14 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 49 | 0.14 |
| (1,497) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 5 | 0.14 |
| (1,497) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 20 | 0.14 |
| (1,497) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 28 | 0.14 |
| (1,486) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 19 | 0.14 |
| (1,486) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 29 | 0.14 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 34 | 0.14 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 34 | 0.14 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 4 | 0.14 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 6 | 0.14 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 10 | 0.14 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 11 | 0.14 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 17 | 0.14 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 30 | 0.14 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 36 | 0.14 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 42 | 0.14 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 45 | 0.14 |
| (1,468) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 23 | 0.14 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 25 | 0.14 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 25 | 0.14 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 25 | 0.14 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 42 | 0.14 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 42 | 0.14 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 42 | 0.14 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.14 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.14 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.14 |
| (1,393) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:HB2 | 27 | 0.14 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:30:LEU:H | 31 | 0.14 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:30:LEU:H | 31 | 0.14 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:30:LEU:H | 31 | 0.14 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 4 | 0.14 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 4 | 0.14 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 9 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 9 | 0.14 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 18 | 0.14 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 18 | 0.14 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 38 | 0.14 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 38 | 0.14 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 42 | 0.14 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 42 | 0.14 |
| (1,358) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:11:GLU:HG3 | 8 | 0.14 |
| (1,348) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 15 | 0.14 |
| (1,348) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 19 | 0.14 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 4 | 0.14 |
| (1,294) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:10:TYR:HA | 8 | 0.14 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 15 | 0.14 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 19 | 0.14 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 21 | 0.14 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 23 | 0.14 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 24 | 0.14 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 26 | 0.14 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 37 | 0.14 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 39 | 0.14 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 45 | 0.14 |
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 48 | 0.14 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 22 | 0.14 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 34 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 1 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 3 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 6 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 11 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 14 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 15 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 20 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 21 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 25 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 27 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 29 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 30 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 41 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 43 | 0.14 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 50 | 0.14 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 6 | 0.14 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 50 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,196) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:HA | 3 | 0.14 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 3 | 0.14 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 3 | 0.14 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 3 | 0.14 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 14 | 0.14 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 14 | 0.14 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 14 | 0.14 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 30 | 0.14 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 30 | 0.14 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 30 | 0.14 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 6 | 0.14 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 6 | 0.14 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 6 | 0.14 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 21 | 0.14 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 21 | 0.14 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 21 | 0.14 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 50 | 0.14 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 50 | 0.14 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 50 | 0.14 |
| (1,175) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:10:TYR:HA | 8 | 0.14 |
| (1,175) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:10:TYR:HA | 8 | 0.14 |
| (1,175) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:10:TYR:HA | 9 | 0.14 |
| (1,175) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:10:TYR:HA | 9 | 0.14 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 44 | 0.14 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 44 | 0.14 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 44 | 0.14 |
| (1,157) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB3 | 31 | 0.14 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 27 | 0.14 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 29 | 0.14 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 19 | 0.14 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 40 | 0.14 |
| (1,118) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:31:GLU:HG3 | 17 | 0.14 |
| (1,116) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 0.14 |
| (1,116) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 0.14 |
| (1,116) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 0.14 |
| (1,116) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 5 | 0.14 |
| (1,116) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 5 | 0.14 |
| (1,116) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 5 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 14 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 14 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 14 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 14 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 14 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 14 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 15 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 15 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 15 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 15 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 15 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 15 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 16 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 16 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 16 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 16 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 16 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 16 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 18 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 18 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 18 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 23 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 23 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 23 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 23 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 23 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 23 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 32 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 32 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 32 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 32 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 32 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 32 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 36 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 36 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 36 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 36 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 36 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 36 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 36 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 43 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 43 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 43 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 43 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 43 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 43 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 46 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 46 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 46 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 46 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 46 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 46 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 1 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 1 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 1 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 1 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 1 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 1 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 9 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 9 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 9 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 9 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 9 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 9 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 10 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 10 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 10 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 10 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 10 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 10 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 24 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 24 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 24 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 24 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 24 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 24 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 36 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 36 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 36 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 36 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 36 | 0.14 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 36 | 0.14 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:7:LYS:HD3 | 20 | 0.14 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HD2 | 20 | 0.14 |
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 20 | 0.14 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:17:LYS:HB2 | 20 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1039) | 1:A:17:LYS:HD2 | 1:A:30:LEU:HB3 | 20 | 0.14 |
| (1,1039) | 1:A:7:LYS:HD3 | 1:A:30:LEU:HB3 | 20 | 0.14 |
| (1,1034) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:13:CYS:H | 14 | 0.14 |
| (1,1034) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:13:CYS:H | 14 | 0.14 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG3 | 1:A:17:LYS:HA | 47 | 0.14 |
| (1,1024) | 1:A:17:LYS:HG2 | 1:A:17:LYS:HA | 47 | 0.14 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:HA | 15 | 0.14 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:HA | 15 | 0.14 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 17 | 0.14 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 17 | 0.14 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 32 | 0.14 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 32 | 0.14 |
| (2,95) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 8 | 0.13 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 38 | 0.13 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 38 | 0.13 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 47 | 0.13 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 47 | 0.13 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 6 | 0.13 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 6 | 0.13 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 19 | 0.13 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 19 | 0.13 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 41 | 0.13 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 41 | 0.13 |
| (2,912) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB3 | 49 | 0.13 |
| (2,909) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 8 | 0.13 |
| (2,904) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 40 | 0.13 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 15 | 0.13 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 16 | 0.13 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 20 | 0.13 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 22 | 0.13 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 25 | 0.13 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 40 | 0.13 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 45 | 0.13 |
| (2,900) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:H | 7 | 0.13 |
| (2,900) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:H | 7 | 0.13 |
| (2,900) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:H | 7 | 0.13 |
| (2,900) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:H | 24 | 0.13 |
| (2,900) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:H | 24 | 0.13 |
| (2,900) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:H | 24 | 0.13 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 4 | 0.13 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 19 | 0.13 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 23 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,892) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 34 | 0.13 |
| (2,887) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 47 | 0.13 |
| (2,881) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 26 | 0.13 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 9 | 0.13 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 15 | 0.13 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 17 | 0.13 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 20 | 0.13 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 21 | 0.13 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 29 | 0.13 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 36 | 0.13 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 48 | 0.13 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 38 | 0.13 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 48 | 0.13 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 17 | 0.13 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 5 | 0.13 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 7 | 0.13 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 40 | 0.13 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 16 | 0.13 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 16 | 0.13 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 18 | 0.13 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 18 | 0.13 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 19 | 0.13 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 19 | 0.13 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 25 | 0.13 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 25 | 0.13 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 26 | 0.13 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 26 | 0.13 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 33 | 0.13 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 33 | 0.13 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 42 | 0.13 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 42 | 0.13 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 48 | 0.13 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 48 | 0.13 |
| (2,861) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 27 | 0.13 |
| (2,854) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 33 | 0.13 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 50 | 0.13 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 6 | 0.13 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 6 | 0.13 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 19 | 0.13 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 19 | 0.13 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 41 | 0.13 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 41 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 2 | 0.13 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 3 | 0.13 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 40 | 0.13 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 42 | 0.13 |
| (2,818) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 1 | 0.13 |
| (2,818) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 44 | 0.13 |
| (2,815) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 15 | 0.13 |
| (2,815) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 15 | 0.13 |
| (2,815) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 29 | 0.13 |
| (2,815) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 29 | 0.13 |
| (2,8) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 23 | 0.13 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 6 | 0.13 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 8 | 0.13 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 13 | 0.13 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 18 | 0.13 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 22 | 0.13 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 27 | 0.13 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 33 | 0.13 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 37 | 0.13 |
| (2,78) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 12 | 0.13 |
| (2,78) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 17 | 0.13 |
| (2,78) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 19 | 0.13 |
| (2,78) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 40 | 0.13 |
| (2,771) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 13 | 0.13 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 15 | 0.13 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 15 | 0.13 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.13 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.13 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.13 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.13 |
| (2,76) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 26 | 0.13 |
| (2,76) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 46 | 0.13 |
| (2,76) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 47 | 0.13 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 19 | 0.13 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 27 | 0.13 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 38 | 0.13 |
| (2,750) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 3 | 0.13 |
| (2,750) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 12 | 0.13 |
| (2,750) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 35 | 0.13 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 6 | 0.13 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 8 | 0.13 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 17 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 19 | 0.13 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 25 | 0.13 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 46 | 0.13 |
| (2,728) | 1:A:15:VAL:HG21 | 1:A:15:VAL:H | 29 | 0.13 |
| (2,728) | 1:A:15:VAL:HG22 | 1:A:15:VAL:H | 29 | 0.13 |
| (2,728) | 1:A:15:VAL:HG23 | 1:A:15:VAL:H | 29 | 0.13 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 12 | 0.13 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 25 | 0.13 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 43 | 0.13 |
| (2,707) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 18 | 0.13 |
| (2,703) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 18 | 0.13 |
| (2,703) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 30 | 0.13 |
| (2,703) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 39 | 0.13 |
| (2,7) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 18 | 0.13 |
| (2,689) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 22 | 0.13 |
| (2,689) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 29 | 0.13 |
| (2,689) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 35 | 0.13 |
| (2,689) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 44 | 0.13 |
| (2,683) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:H | 40 | 0.13 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 4 | 0.13 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 24 | 0.13 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 47 | 0.13 |
| (2,667) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 10 | 0.13 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 42 | 0.13 |
| (2,66) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HA | 6 | 0.13 |
| (2,66) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HA | 6 | 0.13 |
| (2,66) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HA | 6 | 0.13 |
| (2,655) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 39 | 0.13 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 42 | 0.13 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 45 | 0.13 |
| (2,65) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 7 | 0.13 |
| (2,65) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 7 | 0.13 |
| (2,65) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 7 | 0.13 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 23 | 0.13 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 26 | 0.13 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 6 | 0.13 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 6 | 0.13 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 6 | 0.13 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 41 | 0.13 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 41 | 0.13 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 41 | 0.13 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 3 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 11 | 0.13 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 32 | 0.13 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 48 | 0.13 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 1 | 0.13 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 11 | 0.13 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 21 | 0.13 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 36 | 0.13 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 48 | 0.13 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 18 | 0.13 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 33 | 0.13 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 35 | 0.13 |
| (2,609) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 29 | 0.13 |
| (2,609) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 42 | 0.13 |
| (2,608) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 43 | 0.13 |
| (2,607) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 14 | 0.13 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 19 | 0.13 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 48 | 0.13 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 48 | 0.13 |
| (2,595) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 14 | 0.13 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 23 | 0.13 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 23 | 0.13 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 28 | 0.13 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 28 | 0.13 |
| (2,580) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 28 | 0.13 |
| (2,566) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HA | 6 | 0.13 |
| (2,566) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HA | 6 | 0.13 |
| (2,566) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HA | 6 | 0.13 |
| (2,564) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 7 | 0.13 |
| (2,564) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 7 | 0.13 |
| (2,564) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 7 | 0.13 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 6 | 0.13 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 6 | 0.13 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 6 | 0.13 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 41 | 0.13 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 41 | 0.13 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 41 | 0.13 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 36 | 0.13 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 41 | 0.13 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 44 | 0.13 |
| (2,554) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 9 | 0.13 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 2 | 0.13 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 8 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 10 | 0.13 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 22 | 0.13 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 28 | 0.13 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 30 | 0.13 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 32 | 0.13 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 38 | 0.13 |
| (2,551) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 23 | 0.13 |
| (2,550) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 18 | 0.13 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 8 | 0.13 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 29 | 0.13 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 44 | 0.13 |
| (2,537) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 5 | 0.13 |
| (2,537) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 9 | 0.13 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 17 | 0.13 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 17 | 0.13 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 18 | 0.13 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 18 | 0.13 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 31 | 0.13 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 31 | 0.13 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 36 | 0.13 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 36 | 0.13 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 0.13 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 0.13 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 0.13 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 18 | 0.13 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 18 | 0.13 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 18 | 0.13 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 0.13 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 0.13 |
| (2,524) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 0.13 |
| (2,496) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 17 | 0.13 |
| (2,496) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 48 | 0.13 |
| (2,492) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 31 | 0.13 |
| (2,492) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 31 | 0.13 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 8 | 0.13 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 14 | 0.13 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 19 | 0.13 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 34 | 0.13 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 35 | 0.13 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 47 | 0.13 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 50 | 0.13 |
| (2,478) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 12 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,478) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 17 | 0.13 |
| (2,478) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 19 | 0.13 |
| (2,478) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 40 | 0.13 |
| (2,476) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 26 | 0.13 |
| (2,476) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 46 | 0.13 |
| (2,476) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 47 | 0.13 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 36 | 0.13 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 41 | 0.13 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 44 | 0.13 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 15 | 0.13 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 16 | 0.13 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 20 | 0.13 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 22 | 0.13 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 25 | 0.13 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 40 | 0.13 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 45 | 0.13 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 17 | 0.13 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 17 | 0.13 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 18 | 0.13 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 18 | 0.13 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 31 | 0.13 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 31 | 0.13 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 36 | 0.13 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 36 | 0.13 |
| (2,45) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 27 | 0.13 |
| (2,445) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 18 | 0.13 |
| (2,445) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 30 | 0.13 |
| (2,445) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 39 | 0.13 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 42 | 0.13 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 45 | 0.13 |
| (2,436) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 14 | 0.13 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 23 | 0.13 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 26 | 0.13 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 0.13 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 0.13 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 0.13 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 18 | 0.13 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 18 | 0.13 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 18 | 0.13 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 0.13 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 0.13 |
| (2,422) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 3 | 0.13 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 11 | 0.13 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 32 | 0.13 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 48 | 0.13 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 2 | 0.13 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 3 | 0.13 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 40 | 0.13 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 42 | 0.13 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 6 | 0.13 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 8 | 0.13 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 13 | 0.13 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 18 | 0.13 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 22 | 0.13 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 27 | 0.13 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 33 | 0.13 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 37 | 0.13 |
| (2,368) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 3 | 0.13 |
| (2,368) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 12 | 0.13 |
| (2,368) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 35 | 0.13 |
| (2,36) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 29 | 0.13 |
| (2,36) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 42 | 0.13 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 15 | 0.13 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 15 | 0.13 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.13 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.13 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.13 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.13 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 12 | 0.13 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 25 | 0.13 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 43 | 0.13 |
| (2,344) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 10 | 0.13 |
| (2,33) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 34 | 0.13 |
| (2,325) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 47 | 0.13 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 50 | 0.13 |
| (2,322) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 33 | 0.13 |
| (2,314) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 26 | 0.13 |
| (2,312) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 15 | 0.13 |
| (2,312) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 15 | 0.13 |
| (2,312) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 29 | 0.13 |
| (2,312) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 29 | 0.13 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 38 | 0.13 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 38 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 47 | 0.13 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 47 | 0.13 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 17 | 0.13 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 16 | 0.13 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 16 | 0.13 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 18 | 0.13 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 18 | 0.13 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 19 | 0.13 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 19 | 0.13 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 25 | 0.13 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 25 | 0.13 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 26 | 0.13 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 26 | 0.13 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 33 | 0.13 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 33 | 0.13 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 42 | 0.13 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 42 | 0.13 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 48 | 0.13 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 48 | 0.13 |
| (2,3) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 1 | 0.13 |
| (2,3) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 44 | 0.13 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 18 | 0.13 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 33 | 0.13 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 35 | 0.13 |
| (2,271) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 17 | 0.13 |
| (2,271) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 48 | 0.13 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 9 | 0.13 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 15 | 0.13 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 17 | 0.13 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 20 | 0.13 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 21 | 0.13 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 29 | 0.13 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 36 | 0.13 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 48 | 0.13 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 2 | 0.13 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 8 | 0.13 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 10 | 0.13 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 22 | 0.13 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 28 | 0.13 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 30 | 0.13 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 32 | 0.13 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 38 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,246) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:H | 7 | 0.13 |
| (2,246) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:H | 7 | 0.13 |
| (2,246) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:H | 7 | 0.13 |
| (2,246) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:H | 24 | 0.13 |
| (2,246) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:H | 24 | 0.13 |
| (2,246) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:H | 24 | 0.13 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 8 | 0.13 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 29 | 0.13 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 44 | 0.13 |
| (2,226) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 5 | 0.13 |
| (2,226) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 9 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 5 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 7 | 0.13 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 40 | 0.13 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 48 | 0.13 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 48 | 0.13 |
| (2,210) | 1:A:15:VAL:HG21 | 1:A:15:VAL:H | 29 | 0.13 |
| (2,210) | 1:A:15:VAL:HG22 | 1:A:15:VAL:H | 29 | 0.13 |
| (2,210) | 1:A:15:VAL:HG23 | 1:A:15:VAL:H | 29 | 0.13 |
| (2,2) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 14 | 0.13 |
| (2,198) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 39 | 0.13 |
| (2,196) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 22 | 0.13 |
| (2,196) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 29 | 0.13 |
| (2,196) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 35 | 0.13 |
| (2,196) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 44 | 0.13 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 38 | 0.13 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 48 | 0.13 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 8 | 0.13 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 14 | 0.13 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 19 | 0.13 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 34 | 0.13 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 35 | 0.13 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 47 | 0.13 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 50 | 0.13 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 6 | 0.13 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 8 | 0.13 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 17 | 0.13 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 19 | 0.13 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 25 | 0.13 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 46 | 0.13 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 4 | 0.13 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 19 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 23 | 0.13 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 4 | 0.13 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 24 | 0.13 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 47 | 0.13 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 42 | 0.13 |
| (2,168) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 40 | 0.13 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 19 | 0.13 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 27 | 0.13 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 38 | 0.13 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 19 | 0.13 |
| (2,147) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 31 | 0.13 |
| (2,147) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 31 | 0.13 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 23 | 0.13 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 23 | 0.13 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 1 | 0.13 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 11 | 0.13 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 21 | 0.13 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 36 | 0.13 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 48 | 0.13 |
| (2,131) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 43 | 0.13 |
| (2,118) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 13 | 0.13 |
| (2,113) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 18 | 0.13 |
| (2,112) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:H | 40 | 0.13 |
| (2,104) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB3 | 49 | 0.13 |
| (2,102) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 9 | 0.13 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:H | 26 | 0.13 |
| (1,999) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:H | 26 | 0.13 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB3 | 9 | 0.13 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB2 | 9 | 0.13 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB3 | 21 | 0.13 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB2 | 21 | 0.13 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB3 | 43 | 0.13 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB2 | 43 | 0.13 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG3 | 12 | 0.13 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG2 | 12 | 0.13 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG3 | 14 | 0.13 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG2 | 14 | 0.13 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG3 | 16 | 0.13 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG2 | 16 | 0.13 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG3 | 23 | 0.13 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG2 | 23 | 0.13 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 38 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 38 | 0.13 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 47 | 0.13 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 47 | 0.13 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 6 | 0.13 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 6 | 0.13 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 19 | 0.13 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 19 | 0.13 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 41 | 0.13 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 41 | 0.13 |
| (1,886) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB3 | 49 | 0.13 |
| (1,883) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 8 | 0.13 |
| (1,878) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 40 | 0.13 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 15 | 0.13 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 16 | 0.13 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 20 | 0.13 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 22 | 0.13 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 25 | 0.13 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 40 | 0.13 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 45 | 0.13 |
| (1,874) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:H | 7 | 0.13 |
| (1,874) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:H | 7 | 0.13 |
| (1,874) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:H | 7 | 0.13 |
| (1,874) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:H | 24 | 0.13 |
| (1,874) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:H | 24 | 0.13 |
| (1,874) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:H | 24 | 0.13 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 4 | 0.13 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 19 | 0.13 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 23 | 0.13 |
| (1,866) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 34 | 0.13 |
| (1,861) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:24:TYR:H | 47 | 0.13 |
| (1,855) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 26 | 0.13 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 9 | 0.13 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 15 | 0.13 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 17 | 0.13 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 20 | 0.13 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 21 | 0.13 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 29 | 0.13 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 36 | 0.13 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 48 | 0.13 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 38 | 0.13 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 48 | 0.13 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 17 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 5 | 0.13 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 7 | 0.13 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 40 | 0.13 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 16 | 0.13 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 16 | 0.13 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 18 | 0.13 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 18 | 0.13 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 19 | 0.13 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 19 | 0.13 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 25 | 0.13 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 25 | 0.13 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 26 | 0.13 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 26 | 0.13 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 33 | 0.13 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 33 | 0.13 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 42 | 0.13 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 42 | 0.13 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 48 | 0.13 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 48 | 0.13 |
| (1,835) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 27 | 0.13 |
| (1,828) | 1:A:23:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 33 | 0.13 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 50 | 0.13 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 2 | 0.13 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 3 | 0.13 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 40 | 0.13 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 42 | 0.13 |
| (1,792) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 1 | 0.13 |
| (1,792) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 44 | 0.13 |
| (1,790) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 15 | 0.13 |
| (1,790) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 15 | 0.13 |
| (1,790) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 29 | 0.13 |
| (1,790) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 29 | 0.13 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 6 | 0.13 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 8 | 0.13 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 13 | 0.13 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 18 | 0.13 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 22 | 0.13 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 27 | 0.13 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 33 | 0.13 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 37 | 0.13 |
| (1,746) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:10:TYR:H | 13 | 0.13 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 15 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 15 | 0.13 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.13 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.13 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.13 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.13 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 19 | 0.13 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 27 | 0.13 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 38 | 0.13 |
| (1,725) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 3 | 0.13 |
| (1,725) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 12 | 0.13 |
| (1,725) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 35 | 0.13 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 6 | 0.13 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 8 | 0.13 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 17 | 0.13 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 19 | 0.13 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 25 | 0.13 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 46 | 0.13 |
| (1,704) | 1:A:15:VAL:HG21 | 1:A:15:VAL:H | 29 | 0.13 |
| (1,704) | 1:A:15:VAL:HG22 | 1:A:15:VAL:H | 29 | 0.13 |
| (1,704) | 1:A:15:VAL:HG23 | 1:A:15:VAL:H | 29 | 0.13 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 12 | 0.13 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 25 | 0.13 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 43 | 0.13 |
| (1,683) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 18 | 0.13 |
| (1,679) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 18 | 0.13 |
| (1,679) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 30 | 0.13 |
| (1,679) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 39 | 0.13 |
| (1,666) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 22 | 0.13 |
| (1,666) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 29 | 0.13 |
| (1,666) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 35 | 0.13 |
| (1,666) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 44 | 0.13 |
| (1,660) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:9:CYS:H | 40 | 0.13 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 4 | 0.13 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 24 | 0.13 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 47 | 0.13 |
| (1,647) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 10 | 0.13 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 42 | 0.13 |
| (1,636) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 39 | 0.13 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 42 | 0.13 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 45 | 0.13 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 23 | 0.13 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 26 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 3 | 0.13 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 11 | 0.13 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 32 | 0.13 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 48 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 1 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 11 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 21 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 36 | 0.13 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 48 | 0.13 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 18 | 0.13 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 33 | 0.13 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 35 | 0.13 |
| (1,592) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 29 | 0.13 |
| (1,592) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 42 | 0.13 |
| (1,591) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:10:TYR:H | 43 | 0.13 |
| (1,590) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 14 | 0.13 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 19 | 0.13 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 48 | 0.13 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 48 | 0.13 |
| (1,578) | 1:A:2:SER:HA | 1:A:2:SER:HB3 | 14 | 0.13 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 23 | 0.13 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 23 | 0.13 |
| (1,56) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 33 | 0.13 |
| (1,556) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HA | 6 | 0.13 |
| (1,556) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HA | 6 | 0.13 |
| (1,556) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HA | 6 | 0.13 |
| (1,554) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 7 | 0.13 |
| (1,554) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 7 | 0.13 |
| (1,554) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 7 | 0.13 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 6 | 0.13 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 6 | 0.13 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 6 | 0.13 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 41 | 0.13 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 41 | 0.13 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 41 | 0.13 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 36 | 0.13 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 41 | 0.13 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 44 | 0.13 |
| (1,544) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 9 | 0.13 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 2 | 0.13 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 8 | 0.13 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 10 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 22 | 0.13 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 28 | 0.13 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 30 | 0.13 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 32 | 0.13 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 38 | 0.13 |
| (1,541) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:2:SER:HA | 23 | 0.13 |
| (1,540) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 18 | 0.13 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 8 | 0.13 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 29 | 0.13 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 44 | 0.13 |
| (1,527) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 5 | 0.13 |
| (1,527) | 1:A:17:LYS:HB3 | 1:A:17:LYS:HA | 9 | 0.13 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 17 | 0.13 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 17 | 0.13 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 18 | 0.13 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 18 | 0.13 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 31 | 0.13 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 31 | 0.13 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 36 | 0.13 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 36 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 4 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 4 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 4 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 18 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 18 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 18 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 0.13 |
| (1,514) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 0.13 |
| (1,486) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 17 | 0.13 |
| (1,486) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 48 | 0.13 |
| (1,482) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 31 | 0.13 |
| (1,482) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 31 | 0.13 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 8 | 0.13 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 14 | 0.13 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 19 | 0.13 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 34 | 0.13 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 35 | 0.13 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 47 | 0.13 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 50 | 0.13 |
| (1,468) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 12 | 0.13 |
| (1,468) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 17 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,468) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 19 | 0.13 |
| (1,468) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 40 | 0.13 |
| (1,466) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 26 | 0.13 |
| (1,466) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 46 | 0.13 |
| (1,466) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 47 | 0.13 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 7 | 0.13 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 7 | 0.13 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 7 | 0.13 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 13 | 0.13 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 13 | 0.13 |
| (1,428) | 1:A:19:PRO:HD3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 13 | 0.13 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 3 | 0.13 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 3 | 0.13 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 3 | 0.13 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 10 | 0.13 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 10 | 0.13 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 10 | 0.13 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 11 | 0.13 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 11 | 0.13 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 11 | 0.13 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 17 | 0.13 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 17 | 0.13 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 17 | 0.13 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 26 | 0.13 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 26 | 0.13 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 26 | 0.13 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 48 | 0.13 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 48 | 0.13 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 48 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 3 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 3 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 10 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 10 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 12 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 12 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 20 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 20 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 22 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 22 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 25 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 25 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 26 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|----------------|----------|---------------|
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 26 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 27 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 27 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 30 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 30 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 33 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 33 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 35 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 35 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 41 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 41 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 44 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 44 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 46 | 0.13 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 46 | 0.13 |
| (1,333) | 1:A:4:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 3 | 0.13 |
| (1,323) | 1:A:27:CYS:H | 1:A:26:MET:HE3 | 8 | 0.13 |
| (1,323) | 1:A:27:CYS:H | 1:A:26:MET:HE1 | 8 | 0.13 |
| (1,323) | 1:A:27:CYS:H | 1:A:26:MET:HE2 | 8 | 0.13 |
| (1,294) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:10:TYR:HA | 29 | 0.13 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 13 | 0.13 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 22 | 0.13 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 29 | 0.13 |
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 24 | 0.13 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 16 | 0.13 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 27 | 0.13 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 18 | 0.13 |
| (1,257) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HB3 | 37 | 0.13 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 20 | 0.13 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 24 | 0.13 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 12 | 0.13 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 35 | 0.13 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 12 | 0.13 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 12 | 0.13 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 12 | 0.13 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 4 | 0.13 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 5 | 0.13 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 32 | 0.13 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 34 | 0.13 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 36 | 0.13 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 37 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 38 | 0.13 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 45 | 0.13 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 48 | 0.13 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 49 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 1 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 3 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 8 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 11 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 14 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 17 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 21 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 22 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 24 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 25 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 26 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 27 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 28 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 31 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 35 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 36 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 37 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 44 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 45 | 0.13 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 46 | 0.13 |
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:21:ASP:HA | 11 | 0.13 |
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:21:ASP:HA | 11 | 0.13 |
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:21:ASP:HA | 49 | 0.13 |
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:21:ASP:HA | 49 | 0.13 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 35 | 0.13 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 35 | 0.13 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 35 | 0.13 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 46 | 0.13 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 46 | 0.13 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 46 | 0.13 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 20 | 0.13 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 20 | 0.13 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 20 | 0.13 |
| (1,175) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:10:TYR:HA | 33 | 0.13 |
| (1,175) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:10:TYR:HA | 33 | 0.13 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 21 | 0.13 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 2 | 0.13 |
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 2 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,171) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 2 | 0.13 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 36 | 0.13 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 41 | 0.13 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 50 | 0.13 |
| (1,151) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB3 | 41 | 0.13 |
| (1,150) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB2 | 35 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 37 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 37 | 0.13 |
| (1,146) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 37 | 0.13 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 26 | 0.13 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 28 | 0.13 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 34 | 0.13 |
| (1,116) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 39 | 0.13 |
| (1,116) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 39 | 0.13 |
| (1,116) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 39 | 0.13 |
| (1,116) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 42 | 0.13 |
| (1,116) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 42 | 0.13 |
| (1,116) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 42 | 0.13 |
| (1,116) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 49 | 0.13 |
| (1,116) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 49 | 0.13 |
| (1,116) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 49 | 0.13 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD22 | 1:A:30:LEU:HA | 19 | 0.13 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD21 | 1:A:30:LEU:HA | 19 | 0.13 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD23 | 1:A:30:LEU:HA | 19 | 0.13 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD22 | 1:A:30:LEU:HA | 21 | 0.13 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD21 | 1:A:30:LEU:HA | 21 | 0.13 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD23 | 1:A:30:LEU:HA | 21 | 0.13 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD22 | 1:A:30:LEU:HA | 25 | 0.13 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD21 | 1:A:30:LEU:HA | 25 | 0.13 |
| (1,111) | 1:A:30:LEU:HD23 | 1:A:30:LEU:HA | 25 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 5 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 5 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 5 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 5 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 5 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 5 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 8 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 8 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 8 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 8 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 8 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 8 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 13 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 13 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 13 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 13 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 13 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 13 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 28 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 28 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 28 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 28 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 28 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 28 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB3 | 33 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:26:MET:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 33 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:26:MET:HG2 | 33 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:26:MET:HB2 | 33 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:26:MET:HG2 | 33 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:HB2 | 33 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 6 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 6 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 6 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 6 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 6 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 8 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 8 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 8 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 8 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 8 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 8 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 11 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 11 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 11 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 11 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 11 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 11 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 31 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 31 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 31 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 31 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 31 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 31 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 33 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 33 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 33 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 33 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 33 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 33 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 44 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 44 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 44 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 44 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 44 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 44 | 0.13 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HG2 | 24 | 0.13 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HG2 | 24 | 0.13 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HG2 | 24 | 0.13 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.13 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.13 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 24 | 0.13 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:H | 21 | 0.13 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 21 | 0.13 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 15 | 0.13 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 15 | 0.13 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 48 | 0.13 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 48 | 0.13 |
| (2,95) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 45 | 0.12 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 20 | 0.12 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 34 | 0.12 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 45 | 0.12 |
| (2,938) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 50 | 0.12 |
| (2,922) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:10:TYR:H | 8 | 0.12 |
| (2,922) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:10:TYR:H | 8 | 0.12 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 10 | 0.12 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 10 | 0.12 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 1 | 0.12 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 1 | 0.12 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 2 | 0.12 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 2 | 0.12 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 8 | 0.12 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 8 | 0.12 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 22 | 0.12 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 22 | 0.12 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 28 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 28 | 0.12 |
| (2,909) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 45 | 0.12 |
| (2,904) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 46 | 0.12 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 2 | 0.12 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 3 | 0.12 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 9 | 0.12 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 18 | 0.12 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 23 | 0.12 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 31 | 0.12 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 32 | 0.12 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 34 | 0.12 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 36 | 0.12 |
| (2,903) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 49 | 0.12 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 9 | 0.12 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 11 | 0.12 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 41 | 0.12 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 49 | 0.12 |
| (2,881) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.12 |
| (2,881) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 18 | 0.12 |
| (2,881) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 30 | 0.12 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 2 | 0.12 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 14 | 0.12 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 22 | 0.12 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 33 | 0.12 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 35 | 0.12 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 41 | 0.12 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 45 | 0.12 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 10 | 0.12 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 10 | 0.12 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 44 | 0.12 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 44 | 0.12 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 50 | 0.12 |
| (2,875) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 50 | 0.12 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 36 | 0.12 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 36 | 0.12 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 36 | 0.12 |
| (2,870) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 33 | 0.12 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 3 | 0.12 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 13 | 0.12 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 23 | 0.12 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 1 | 0.12 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 1 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|--------------|----------|---------------|
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 23 | 0.12 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 23 | 0.12 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 27 | 0.12 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 27 | 0.12 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 32 | 0.12 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 32 | 0.12 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 34 | 0.12 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 34 | 0.12 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 38 | 0.12 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 38 | 0.12 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 46 | 0.12 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 46 | 0.12 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 47 | 0.12 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 47 | 0.12 |
| (2,863) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:32:ARG:H | 10 | 0.12 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 5 | 0.12 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 28 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 1 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 1 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 2 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 2 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 8 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 8 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 22 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 22 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 28 | 0.12 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 28 | 0.12 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 23 | 0.12 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 47 | 0.12 |
| (2,842) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 3 | 0.12 |
| (2,842) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 13 | 0.12 |
| (2,842) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 17 | 0.12 |
| (2,842) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 23 | 0.12 |
| (2,837) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:4:GLN:H | 43 | 0.12 |
| (2,837) | 1:A:4:GLN:HB3 | 1:A:4:GLN:H | 43 | 0.12 |
| (2,815) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 2 | 0.12 |
| (2,815) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 2 | 0.12 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 1 | 0.12 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 17 | 0.12 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 20 | 0.12 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 21 | 0.12 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 44 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,785) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB2 | 47 | 0.12 |
| (2,78) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 6 | 0.12 |
| (2,78) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 25 | 0.12 |
| (2,78) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 27 | 0.12 |
| (2,78) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 41 | 0.12 |
| (2,78) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 43 | 0.12 |
| (2,777) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:H | 46 | 0.12 |
| (2,767) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 26 | 0.12 |
| (2,767) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 26 | 0.12 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 18 | 0.12 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 18 | 0.12 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 26 | 0.12 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 26 | 0.12 |
| (2,76) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 16 | 0.12 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 7 | 0.12 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 24 | 0.12 |
| (2,750) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 9 | 0.12 |
| (2,736) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:H | 31 | 0.12 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 4 | 0.12 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 4 | 0.12 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 4 | 0.12 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 5 | 0.12 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 5 | 0.12 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 5 | 0.12 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 12 | 0.12 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 12 | 0.12 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 12 | 0.12 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 30 | 0.12 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 30 | 0.12 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 30 | 0.12 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 39 | 0.12 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 39 | 0.12 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 39 | 0.12 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.12 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 6 | 0.12 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 9 | 0.12 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 22 | 0.12 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.12 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 35 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,707) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 43 | 0.12 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 2 | 0.12 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 6 | 0.12 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 12 | 0.12 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 20 | 0.12 |
| (2,703) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 41 | 0.12 |
| (2,7) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 12 | 0.12 |
| (2,7) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 48 | 0.12 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.12 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.12 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.12 |
| (2,689) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 9 | 0.12 |
| (2,689) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 15 | 0.12 |
| (2,689) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 25 | 0.12 |
| (2,688) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 27 | 0.12 |
| (2,688) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 42 | 0.12 |
| (2,688) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 47 | 0.12 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 19 | 0.12 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 19 | 0.12 |
| (2,687) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 19 | 0.12 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 13 | 0.12 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 19 | 0.12 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 19 | 0.12 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 19 | 0.12 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 37 | 0.12 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 37 | 0.12 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 37 | 0.12 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 41 | 0.12 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 41 | 0.12 |
| (2,67) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 41 | 0.12 |
| (2,667) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 2 | 0.12 |
| (2,667) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 17 | 0.12 |
| (2,667) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 23 | 0.12 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 2 | 0.12 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 11 | 0.12 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 17 | 0.12 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 25 | 0.12 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG11 | 1:A:12:GLN:HE22 | 31 | 0.12 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG12 | 1:A:12:GLN:HE22 | 31 | 0.12 |
| (2,664) | 1:A:15:VAL:HG13 | 1:A:12:GLN:HE22 | 31 | 0.12 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 29 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 29 | 0.12 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 45 | 0.12 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 45 | 0.12 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 2 | 0.12 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 16 | 0.12 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 29 | 0.12 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 46 | 0.12 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 7 | 0.12 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 20 | 0.12 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 22 | 0.12 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 23 | 0.12 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 25 | 0.12 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 28 | 0.12 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 39 | 0.12 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 41 | 0.12 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 6 | 0.12 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 44 | 0.12 |
| (2,609) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 13 | 0.12 |
| (2,609) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 45 | 0.12 |
| (2,607) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 3 | 0.12 |
| (2,607) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 40 | 0.12 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 22 | 0.12 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 38 | 0.12 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 46 | 0.12 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 13 | 0.12 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 13 | 0.12 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG11 | 20 | 0.12 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG12 | 20 | 0.12 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG13 | 20 | 0.12 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 20 | 0.12 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 20 | 0.12 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 20 | 0.12 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 20 | 0.12 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 20 | 0.12 |
| (2,589) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 20 | 0.12 |
| (2,588) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 33 | 0.12 |
| (2,588) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 33 | 0.12 |
| (2,588) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 33 | 0.12 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 5 | 0.12 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 5 | 0.12 |
| (2,582) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 28 | 0.12 |
| (2,582) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 33 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 31 | 0.12 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 31 | 0.12 |
| (2,577) | 1:A:16:ASN:HB3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 31 | 0.12 |
| (2,570) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 3 | 0.12 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 19 | 0.12 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 19 | 0.12 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 19 | 0.12 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 37 | 0.12 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 37 | 0.12 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 37 | 0.12 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 41 | 0.12 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 41 | 0.12 |
| (2,567) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 41 | 0.12 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 28 | 0.12 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 34 | 0.12 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 42 | 0.12 |
| (2,555) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 33 | 0.12 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 12 | 0.12 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 44 | 0.12 |
| (2,550) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 12 | 0.12 |
| (2,550) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 48 | 0.12 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 6 | 0.12 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 39 | 0.12 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 4 | 0.12 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 4 | 0.12 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 4 | 0.12 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 5 | 0.12 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 5 | 0.12 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 5 | 0.12 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 12 | 0.12 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 12 | 0.12 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 12 | 0.12 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 30 | 0.12 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 30 | 0.12 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 30 | 0.12 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 39 | 0.12 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 39 | 0.12 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 39 | 0.12 |
| (2,507) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 15 | 0.12 |
| (2,496) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 8 | 0.12 |
| (2,496) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 18 | 0.12 |
| (2,496) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 38 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 27 | 0.12 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 27 | 0.12 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 12 | 0.12 |
| (2,483) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 49 | 0.12 |
| (2,48) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:H | 46 | 0.12 |
| (2,478) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 6 | 0.12 |
| (2,478) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 25 | 0.12 |
| (2,478) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 27 | 0.12 |
| (2,478) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 41 | 0.12 |
| (2,478) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 43 | 0.12 |
| (2,476) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 16 | 0.12 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 28 | 0.12 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 34 | 0.12 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 42 | 0.12 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 2 | 0.12 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 3 | 0.12 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 9 | 0.12 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 18 | 0.12 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 23 | 0.12 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 31 | 0.12 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 32 | 0.12 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 34 | 0.12 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 36 | 0.12 |
| (2,466) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 49 | 0.12 |
| (2,455) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:32:ARG:H | 10 | 0.12 |
| (2,445) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 41 | 0.12 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.12 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.12 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.12 |
| (2,436) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 3 | 0.12 |
| (2,436) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 40 | 0.12 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 2 | 0.12 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 16 | 0.12 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 29 | 0.12 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 46 | 0.12 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 23 | 0.12 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 47 | 0.12 |
| (2,395) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 27 | 0.12 |
| (2,395) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 42 | 0.12 |
| (2,395) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 47 | 0.12 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 2 | 0.12 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 3 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 6 | 0.12 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 12 | 0.12 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 20 | 0.12 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 29 | 0.12 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 29 | 0.12 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 45 | 0.12 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 45 | 0.12 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 1 | 0.12 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 17 | 0.12 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 20 | 0.12 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 21 | 0.12 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 44 | 0.12 |
| (2,368) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 9 | 0.12 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG11 | 20 | 0.12 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG12 | 20 | 0.12 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG13 | 20 | 0.12 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 20 | 0.12 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 20 | 0.12 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 20 | 0.12 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 20 | 0.12 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 20 | 0.12 |
| (2,362) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 20 | 0.12 |
| (2,36) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 13 | 0.12 |
| (2,36) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 45 | 0.12 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 18 | 0.12 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 18 | 0.12 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 26 | 0.12 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 26 | 0.12 |
| (2,354) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 15 | 0.12 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.12 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 6 | 0.12 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 9 | 0.12 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 22 | 0.12 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.12 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 35 | 0.12 |
| (2,344) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 2 | 0.12 |
| (2,344) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 17 | 0.12 |
| (2,344) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 23 | 0.12 |
| (2,341) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 3 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,341) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 13 | 0.12 |
| (2,341) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 17 | 0.12 |
| (2,341) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 23 | 0.12 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 19 | 0.12 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 19 | 0.12 |
| (2,327) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 19 | 0.12 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 5 | 0.12 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 28 | 0.12 |
| (2,315) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 28 | 0.12 |
| (2,315) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 33 | 0.12 |
| (2,314) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.12 |
| (2,314) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 18 | 0.12 |
| (2,314) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 30 | 0.12 |
| (2,312) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 2 | 0.12 |
| (2,312) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 2 | 0.12 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 10 | 0.12 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 10 | 0.12 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 1 | 0.12 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 1 | 0.12 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 23 | 0.12 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 23 | 0.12 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 27 | 0.12 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 27 | 0.12 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 32 | 0.12 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 32 | 0.12 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 34 | 0.12 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 34 | 0.12 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 38 | 0.12 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 38 | 0.12 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 46 | 0.12 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 46 | 0.12 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 47 | 0.12 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 47 | 0.12 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 10 | 0.12 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 10 | 0.12 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 44 | 0.12 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 44 | 0.12 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 50 | 0.12 |
| (2,29) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 50 | 0.12 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 6 | 0.12 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 44 | 0.12 |
| (2,287) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB2 | 47 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,286) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 33 | 0.12 |
| (2,28) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:4:GLN:H | 43 | 0.12 |
| (2,28) | 1:A:4:GLN:HB3 | 1:A:4:GLN:H | 43 | 0.12 |
| (2,271) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 8 | 0.12 |
| (2,271) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 18 | 0.12 |
| (2,271) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 38 | 0.12 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 2 | 0.12 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 14 | 0.12 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 22 | 0.12 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 33 | 0.12 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 35 | 0.12 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 41 | 0.12 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 45 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 12 | 0.12 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 44 | 0.12 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 36 | 0.12 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 36 | 0.12 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 36 | 0.12 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 6 | 0.12 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 39 | 0.12 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 3 | 0.12 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 13 | 0.12 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 23 | 0.12 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 13 | 0.12 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 13 | 0.12 |
| (2,219) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:H | 31 | 0.12 |
| (2,196) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 9 | 0.12 |
| (2,196) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 15 | 0.12 |
| (2,196) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 25 | 0.12 |
| (2,188) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 33 | 0.12 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 12 | 0.12 |
| (2,184) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 49 | 0.12 |
| (2,181) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 3 | 0.12 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 9 | 0.12 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 11 | 0.12 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 41 | 0.12 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 49 | 0.12 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 13 | 0.12 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 2 | 0.12 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 11 | 0.12 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 17 | 0.12 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 25 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,168) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 46 | 0.12 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 20 | 0.12 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 34 | 0.12 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 45 | 0.12 |
| (2,160) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 50 | 0.12 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 7 | 0.12 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 24 | 0.12 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 22 | 0.12 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 38 | 0.12 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 46 | 0.12 |
| (2,149) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 26 | 0.12 |
| (2,149) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 26 | 0.12 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 5 | 0.12 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 5 | 0.12 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 27 | 0.12 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 27 | 0.12 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 7 | 0.12 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 20 | 0.12 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 22 | 0.12 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 23 | 0.12 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 25 | 0.12 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 28 | 0.12 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 39 | 0.12 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 41 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:10:TYR:H | 8 | 0.12 |
| (2,138) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:10:TYR:H | 8 | 0.12 |
| (2,113) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 43 | 0.12 |
| (1,996) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 23 | 0.12 |
| (1,996) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 23 | 0.12 |
| (1,996) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB3 | 35 | 0.12 |
| (1,996) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HB2 | 35 | 0.12 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB3 | 6 | 0.12 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB2 | 6 | 0.12 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB3 | 36 | 0.12 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB2 | 36 | 0.12 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB3 | 45 | 0.12 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB2 | 45 | 0.12 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB3 | 46 | 0.12 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB2 | 46 | 0.12 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG3 | 35 | 0.12 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG2 | 35 | 0.12 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG3 | 39 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG2 | 39 | 0.12 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG3 | 41 | 0.12 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG2 | 41 | 0.12 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG3 | 48 | 0.12 |
| (1,963) | 1:A:32:ARG:H | 1:A:32:ARG:HG2 | 48 | 0.12 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 16 | 0.12 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 16 | 0.12 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 35 | 0.12 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 35 | 0.12 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 41 | 0.12 |
| (1,954) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:19:PRO:HD3 | 41 | 0.12 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 20 | 0.12 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 34 | 0.12 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 45 | 0.12 |
| (1,912) | 1:A:11:GLU:H | 1:A:12:GLN:H | 50 | 0.12 |
| (1,896) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:10:TYR:H | 8 | 0.12 |
| (1,896) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:10:TYR:H | 8 | 0.12 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 10 | 0.12 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 10 | 0.12 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 1 | 0.12 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 1 | 0.12 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 2 | 0.12 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 2 | 0.12 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 8 | 0.12 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 8 | 0.12 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 22 | 0.12 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 22 | 0.12 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 28 | 0.12 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 28 | 0.12 |
| (1,883) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 45 | 0.12 |
| (1,878) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 46 | 0.12 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 2 | 0.12 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 3 | 0.12 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 9 | 0.12 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 18 | 0.12 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 23 | 0.12 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 31 | 0.12 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 32 | 0.12 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 34 | 0.12 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 36 | 0.12 |
| (1,877) | 1:A:33:SER:HA | 1:A:33:SER:H | 49 | 0.12 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 9 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 11 | 0.12 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 41 | 0.12 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 49 | 0.12 |
| (1,855) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 6 | 0.12 |
| (1,855) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 18 | 0.12 |
| (1,855) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 30 | 0.12 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 2 | 0.12 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 14 | 0.12 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 22 | 0.12 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 33 | 0.12 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 35 | 0.12 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 41 | 0.12 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 45 | 0.12 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 10 | 0.12 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 10 | 0.12 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 44 | 0.12 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 44 | 0.12 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG3 | 1:A:4:GLN:HA | 50 | 0.12 |
| (1,849) | 1:A:4:GLN:HG2 | 1:A:4:GLN:HA | 50 | 0.12 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 36 | 0.12 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 36 | 0.12 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 36 | 0.12 |
| (1,844) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB3 | 33 | 0.12 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 3 | 0.12 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 13 | 0.12 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 23 | 0.12 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 1 | 0.12 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 1 | 0.12 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 23 | 0.12 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 23 | 0.12 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 27 | 0.12 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 27 | 0.12 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 32 | 0.12 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 32 | 0.12 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 34 | 0.12 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 34 | 0.12 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 38 | 0.12 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 38 | 0.12 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 46 | 0.12 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 46 | 0.12 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 47 | 0.12 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 47 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,837) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:32:ARG:H | 10 | 0.12 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 5 | 0.12 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 28 | 0.12 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 23 | 0.12 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 47 | 0.12 |
| (1,816) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 3 | 0.12 |
| (1,816) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 13 | 0.12 |
| (1,816) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 17 | 0.12 |
| (1,816) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 23 | 0.12 |
| (1,811) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:4:GLN:H | 43 | 0.12 |
| (1,811) | 1:A:4:GLN:HB3 | 1:A:4:GLN:H | 43 | 0.12 |
| (1,790) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 2 | 0.12 |
| (1,790) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 2 | 0.12 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 1 | 0.12 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 17 | 0.12 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 20 | 0.12 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 21 | 0.12 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 44 | 0.12 |
| (1,760) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB2 | 47 | 0.12 |
| (1,752) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:H | 46 | 0.12 |
| (1,742) | 1:A:10:TYR:HD1 | 1:A:27:CYS:HB3 | 26 | 0.12 |
| (1,742) | 1:A:10:TYR:HD2 | 1:A:27:CYS:HB3 | 26 | 0.12 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 18 | 0.12 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 18 | 0.12 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 26 | 0.12 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 26 | 0.12 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 7 | 0.12 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 24 | 0.12 |
| (1,725) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 9 | 0.12 |
| (1,712) | 1:A:16:ASN:HB2 | 1:A:16:ASN:H | 31 | 0.12 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 4 | 0.12 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 4 | 0.12 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 4 | 0.12 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 5 | 0.12 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 5 | 0.12 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 12 | 0.12 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 12 | 0.12 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 12 | 0.12 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 30 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 30 | 0.12 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 30 | 0.12 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 39 | 0.12 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 39 | 0.12 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 39 | 0.12 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.12 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 6 | 0.12 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 9 | 0.12 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 22 | 0.12 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 28 | 0.12 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 35 | 0.12 |
| (1,683) | 1:A:9:CYS:HB3 | 1:A:9:CYS:H | 43 | 0.12 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 2 | 0.12 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 3 | 0.12 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 6 | 0.12 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 12 | 0.12 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 20 | 0.12 |
| (1,679) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 41 | 0.12 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,666) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 9 | 0.12 |
| (1,666) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,666) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 25 | 0.12 |
| (1,665) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 27 | 0.12 |
| (1,665) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 42 | 0.12 |
| (1,665) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 47 | 0.12 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE1 | 19 | 0.12 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE2 | 19 | 0.12 |
| (1,664) | 1:A:23:CYS:HA | 1:A:26:MET:HE3 | 19 | 0.12 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 13 | 0.12 |
| (1,647) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 2 | 0.12 |
| (1,647) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 17 | 0.12 |
| (1,647) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 23 | 0.12 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 2 | 0.12 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 11 | 0.12 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 17 | 0.12 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 25 | 0.12 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 29 | 0.12 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 29 | 0.12 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 45 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 45 | 0.12 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 2 | 0.12 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 16 | 0.12 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 29 | 0.12 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 46 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 7 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 20 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 22 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 23 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 25 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 28 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 39 | 0.12 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 41 | 0.12 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 6 | 0.12 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 44 | 0.12 |
| (1,592) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 13 | 0.12 |
| (1,592) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 45 | 0.12 |
| (1,590) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 3 | 0.12 |
| (1,590) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 40 | 0.12 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 22 | 0.12 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 38 | 0.12 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 46 | 0.12 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 13 | 0.12 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 13 | 0.12 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG11 | 20 | 0.12 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG12 | 20 | 0.12 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG13 | 20 | 0.12 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 20 | 0.12 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 20 | 0.12 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 20 | 0.12 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG11 | 20 | 0.12 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG12 | 20 | 0.12 |
| (1,572) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG13 | 20 | 0.12 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 5 | 0.12 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 5 | 0.12 |
| (1,566) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 28 | 0.12 |
| (1,566) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 33 | 0.12 |
| (1,559) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:10:TYR:HA | 3 | 0.12 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 19 | 0.12 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 19 | 0.12 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 19 | 0.12 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 37 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 37 | 0.12 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 37 | 0.12 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG3 | 41 | 0.12 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG3 | 41 | 0.12 |
| (1,557) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG3 | 41 | 0.12 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 28 | 0.12 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 34 | 0.12 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 42 | 0.12 |
| (1,545) | 1:A:20:PHE:HA | 1:A:23:CYS:HB3 | 33 | 0.12 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 12 | 0.12 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 44 | 0.12 |
| (1,540) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 12 | 0.12 |
| (1,540) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 48 | 0.12 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 6 | 0.12 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 39 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:27:CYS:HB2 | 31 | 0.12 |
| (1,53) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:27:CYS:HB2 | 31 | 0.12 |
| (1,497) | 1:A:25:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 15 | 0.12 |
| (1,486) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 8 | 0.12 |
| (1,486) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 18 | 0.12 |
| (1,486) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 38 | 0.12 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 27 | 0.12 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 27 | 0.12 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 12 | 0.12 |
| (1,473) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 49 | 0.12 |
| (1,468) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 6 | 0.12 |
| (1,468) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 25 | 0.12 |
| (1,468) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 27 | 0.12 |
| (1,468) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 41 | 0.12 |
| (1,468) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 43 | 0.12 |
| (1,466) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 16 | 0.12 |
| (1,420) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:29:PRO:HD3 | 37 | 0.12 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 12 | 0.12 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 12 | 0.12 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 12 | 0.12 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 30 | 0.12 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 30 | 0.12 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 30 | 0.12 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 34 | 0.12 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 34 | 0.12 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 34 | 0.12 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 47 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 47 | 0.12 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 47 | 0.12 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:30:LEU:H | 9 | 0.12 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:30:LEU:H | 9 | 0.12 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:30:LEU:H | 9 | 0.12 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:30:LEU:H | 10 | 0.12 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:30:LEU:H | 10 | 0.12 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:30:LEU:H | 10 | 0.12 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:30:LEU:H | 18 | 0.12 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:30:LEU:H | 18 | 0.12 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:30:LEU:H | 18 | 0.12 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:30:LEU:H | 43 | 0.12 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:30:LEU:H | 43 | 0.12 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:30:LEU:H | 43 | 0.12 |
| (1,378) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 1 | 0.12 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 11 | 0.12 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 11 | 0.12 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 32 | 0.12 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 32 | 0.12 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 34 | 0.12 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 34 | 0.12 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 36 | 0.12 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 36 | 0.12 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 39 | 0.12 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 39 | 0.12 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 43 | 0.12 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 43 | 0.12 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 45 | 0.12 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 45 | 0.12 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 50 | 0.12 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 50 | 0.12 |
| (1,348) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 6 | 0.12 |
| (1,348) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 10 | 0.12 |
| (1,348) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 23 | 0.12 |
| (1,348) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 39 | 0.12 |
| (1,288) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:12:GLN:HB3 | 33 | 0.12 |
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 26 | 0.12 |
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 41 | 0.12 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 23 | 0.12 |
| (1,262) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 1 | 0.12 |
| (1,262) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 41 | 0.12 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 48 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 50 | 0.12 |
| (1,234) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HG2 | 3 | 0.12 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE3 | 35 | 0.12 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE1 | 35 | 0.12 |
| (1,232) | 1:A:26:MET:H | 1:A:26:MET:HE2 | 35 | 0.12 |
| (1,218) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:23:CYS:HB3 | 38 | 0.12 |
| (1,218) | 1:A:23:CYS:H | 1:A:23:CYS:HB3 | 47 | 0.12 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 17 | 0.12 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 40 | 0.12 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 42 | 0.12 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 46 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 2 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 5 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 10 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 19 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 29 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 32 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 42 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 43 | 0.12 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 49 | 0.12 |
| (1,196) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:HA | 16 | 0.12 |
| (1,196) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:HA | 36 | 0.12 |
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:21:ASP:HA | 38 | 0.12 |
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:21:ASP:HA | 38 | 0.12 |
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:21:ASP:HA | 47 | 0.12 |
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:21:ASP:HA | 47 | 0.12 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 18 | 0.12 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 18 | 0.12 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 18 | 0.12 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG22 | 18 | 0.12 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG21 | 18 | 0.12 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE1 | 1:A:18:VAL:HG23 | 18 | 0.12 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 18 | 0.12 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 18 | 0.12 |
| (1,186) | 1:A:26:MET:HE2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 18 | 0.12 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 10 | 0.12 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 10 | 0.12 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 10 | 0.12 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 17 | 0.12 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 17 | 0.12 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 17 | 0.12 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 50 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 50 | 0.12 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 50 | 0.12 |
| (1,180) | 1:A:14:ASN:HA | 1:A:17:LYS:HA | 30 | 0.12 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 12 | 0.12 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 12 | 0.12 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 12 | 0.12 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 26 | 0.12 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 30 | 0.12 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 41 | 0.12 |
| (1,170) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 16 | 0.12 |
| (1,170) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 16 | 0.12 |
| (1,170) | 1:A:31:GLU:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 16 | 0.12 |
| (1,159) | 1:A:18:VAL:HB | 1:A:19:PRO:HD3 | 24 | 0.12 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 16 | 0.12 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 28 | 0.12 |
| (1,146) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 5 | 0.12 |
| (1,146) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 5 | 0.12 |
| (1,146) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 5 | 0.12 |
| (1,132) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HB2 | 42 | 0.12 |
| (1,131) | 1:A:17:LYS:HA | 1:A:17:LYS:HD2 | 33 | 0.12 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 26 | 0.12 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 26 | 0.12 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 26 | 0.12 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 26 | 0.12 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 26 | 0.12 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 26 | 0.12 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 43 | 0.12 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 43 | 0.12 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 43 | 0.12 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 43 | 0.12 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 43 | 0.12 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 43 | 0.12 |
| (1,1030) | 1:A:8:TYR:HD1 | 1:A:11:GLU:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,1030) | 1:A:8:TYR:HD2 | 1:A:11:GLU:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,1030) | 1:A:8:TYR:HD1 | 1:A:12:GLN:HG3 | 14 | 0.12 |
| (1,1030) | 1:A:8:TYR:HD2 | 1:A:12:GLN:HG3 | 14 | 0.12 |
| (1,1030) | 1:A:8:TYR:HD1 | 1:A:12:GLN:HG2 | 14 | 0.12 |
| (1,1030) | 1:A:8:TYR:HD2 | 1:A:12:GLN:HG2 | 14 | 0.12 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HG2 | 19 | 0.12 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HG2 | 19 | 0.12 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HG2 | 19 | 0.12 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.12 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 19 | 0.12 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HG2 | 20 | 0.12 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HG2 | 20 | 0.12 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HG2 | 20 | 0.12 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.12 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.12 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 20 | 0.12 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HG2 | 34 | 0.12 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HG2 | 34 | 0.12 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HG2 | 34 | 0.12 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.12 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.12 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 34 | 0.12 |
| (1,1007) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HG2 | 32 | 0.12 |
| (1,1007) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HG2 | 32 | 0.12 |
| (1,1007) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HG3 | 32 | 0.12 |
| (1,1007) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HG3 | 32 | 0.12 |
| (1,1007) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:11:GLU:HB2 | 32 | 0.12 |
| (1,1007) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:11:GLU:HB2 | 32 | 0.12 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:H | 36 | 0.12 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 36 | 0.12 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 2 | 0.12 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 2 | 0.12 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 22 | 0.12 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 22 | 0.12 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 23 | 0.12 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 23 | 0.12 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 33 | 0.12 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 33 | 0.12 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 34 | 0.12 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 34 | 0.12 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 40 | 0.12 |
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 40 | 0.12 |
| (2,95) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 14 | 0.11 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (2,937) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (2,929) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 39 | 0.11 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 17 | 0.11 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 17 | 0.11 |
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 22 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,917) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 22 | 0.11 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 4 | 0.11 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 4 | 0.11 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 25 | 0.11 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 25 | 0.11 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 31 | 0.11 |
| (2,914) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 31 | 0.11 |
| (2,910) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HG3 | 49 | 0.11 |
| (2,910) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HG3 | 49 | 0.11 |
| (2,909) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 14 | 0.11 |
| (2,904) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 3 | 0.11 |
| (2,904) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 9 | 0.11 |
| (2,904) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 31 | 0.11 |
| (2,904) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 50 | 0.11 |
| (2,900) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:H | 37 | 0.11 |
| (2,900) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:H | 37 | 0.11 |
| (2,900) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:H | 37 | 0.11 |
| (2,898) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 10 | 0.11 |
| (2,892) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 15 | 0.11 |
| (2,892) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 31 | 0.11 |
| (2,881) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 13 | 0.11 |
| (2,881) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 19 | 0.11 |
| (2,881) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 24 | 0.11 |
| (2,881) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 38 | 0.11 |
| (2,881) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 42 | 0.11 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 12 | 0.11 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 19 | 0.11 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 26 | 0.11 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 32 | 0.11 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 46 | 0.11 |
| (2,876) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 50 | 0.11 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 28 | 0.11 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 28 | 0.11 |
| (2,873) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 28 | 0.11 |
| (2,867) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 18 | 0.11 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 18 | 0.11 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 24 | 0.11 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 31 | 0.11 |
| (2,866) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 37 | 0.11 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 30 | 0.11 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 30 | 0.11 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 44 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 44 | 0.11 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 49 | 0.11 |
| (2,864) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 49 | 0.11 |
| (2,863) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:32:ARG:H | 39 | 0.11 |
| (2,861) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 2 | 0.11 |
| (2,861) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 48 | 0.11 |
| (2,851) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 31 | 0.11 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 4 | 0.11 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 4 | 0.11 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 25 | 0.11 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 25 | 0.11 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 31 | 0.11 |
| (2,85) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 31 | 0.11 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 8 | 0.11 |
| (2,843) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 50 | 0.11 |
| (2,842) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 25 | 0.11 |
| (2,842) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 26 | 0.11 |
| (2,842) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 48 | 0.11 |
| (2,837) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:4:GLN:H | 50 | 0.11 |
| (2,837) | 1:A:4:GLN:HB3 | 1:A:4:GLN:H | 50 | 0.11 |
| (2,818) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 2 | 0.11 |
| (2,818) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 10 | 0.11 |
| (2,818) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 11 | 0.11 |
| (2,815) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 3 | 0.11 |
| (2,815) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 3 | 0.11 |
| (2,815) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 41 | 0.11 |
| (2,815) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 41 | 0.11 |
| (2,811) | 1:A:27:CYS:H | 1:A:28:SER:H | 18 | 0.11 |
| (2,809) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:31:GLU:H | 44 | 0.11 |
| (2,799) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB2 | 46 | 0.11 |
| (2,795) | 1:A:24:TYR:HA | 1:A:28:SER:H | 33 | 0.11 |
| (2,794) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 3 | 0.11 |
| (2,794) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 32 | 0.11 |
| (2,788) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 9 | 0.11 |
| (2,78) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 1 | 0.11 |
| (2,78) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 10 | 0.11 |
| (2,78) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 11 | 0.11 |
| (2,78) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 13 | 0.11 |
| (2,78) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 15 | 0.11 |
| (2,78) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 33 | 0.11 |
| (2,777) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:H | 29 | 0.11 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.11 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 16 | 0.11 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 16 | 0.11 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 24 | 0.11 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 24 | 0.11 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 33 | 0.11 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 33 | 0.11 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 46 | 0.11 |
| (2,760) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 46 | 0.11 |
| (2,76) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 7 | 0.11 |
| (2,76) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 28 | 0.11 |
| (2,76) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 50 | 0.11 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 28 | 0.11 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 32 | 0.11 |
| (2,751) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 33 | 0.11 |
| (2,750) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 6 | 0.11 |
| (2,750) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 19 | 0.11 |
| (2,750) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 21 | 0.11 |
| (2,750) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 26 | 0.11 |
| (2,750) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 27 | 0.11 |
| (2,750) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 30 | 0.11 |
| (2,750) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 39 | 0.11 |
| (2,750) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 45 | 0.11 |
| (2,748) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 4 | 0.11 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 12 | 0.11 |
| (2,732) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 50 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 1 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 1 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 1 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 2 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 2 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 2 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 3 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 3 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 3 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 6 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 6 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 6 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 7 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 7 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 7 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 8 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 8 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 8 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 9 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 9 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 9 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 10 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 10 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 10 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 11 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 11 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 11 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 13 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 13 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 13 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 14 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 14 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 14 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 15 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 15 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 15 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 16 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 16 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 16 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 17 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 17 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 17 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 18 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 18 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 18 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 19 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 19 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 19 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 20 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 20 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 20 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 21 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 21 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 21 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 22 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 22 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 22 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 23 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 23 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 23 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 24 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 24 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 24 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 25 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 25 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 25 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 26 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 26 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 26 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 27 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 27 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 27 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 28 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 28 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 28 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 29 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 29 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 29 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 31 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 31 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 31 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 32 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 32 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 32 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 33 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 33 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 33 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 34 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 34 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 34 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 35 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 35 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 35 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 36 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 36 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 36 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 37 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 37 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 37 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 38 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 38 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 38 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 40 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 40 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 40 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 41 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 41 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 41 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 42 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 42 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 42 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 43 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 43 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 43 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 44 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 44 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 44 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 45 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 45 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 45 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 46 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 46 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 46 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 47 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 47 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 47 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 48 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 48 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 48 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 49 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 49 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 49 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 50 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 50 | 0.11 |
| (2,730) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 50 | 0.11 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 35 | 0.11 |
| (2,719) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 35 | 0.11 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 10 | 0.11 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 18 | 0.11 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 20 | 0.11 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.11 |
| (2,718) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 50 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 15 | 0.11 |
| (2,704) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 48 | 0.11 |
| (2,703) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 15 | 0.11 |
| (2,703) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 28 | 0.11 |
| (2,7) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 28 | 0.11 |
| (2,7) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 41 | 0.11 |
| (2,697) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 18 | 0.11 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.11 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.11 |
| (2,690) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.11 |
| (2,689) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 46 | 0.11 |
| (2,688) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 4 | 0.11 |
| (2,688) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 8 | 0.11 |
| (2,688) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 14 | 0.11 |
| (2,688) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 16 | 0.11 |
| (2,688) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 28 | 0.11 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 10 | 0.11 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 27 | 0.11 |
| (2,678) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 35 | 0.11 |
| (2,667) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 35 | 0.11 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 14 | 0.11 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 32 | 0.11 |
| (2,665) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 44 | 0.11 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 8 | 0.11 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 8 | 0.11 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 26 | 0.11 |
| (2,651) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 26 | 0.11 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 5 | 0.11 |
| (2,650) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 24 | 0.11 |
| (2,65) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 37 | 0.11 |
| (2,65) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 37 | 0.11 |
| (2,65) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 37 | 0.11 |
| (2,647) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 20 | 0.11 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 3 | 0.11 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 3 | 0.11 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 3 | 0.11 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 8 | 0.11 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 8 | 0.11 |
| (2,64) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 8 | 0.11 |
| (2,633) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HA | 37 | 0.11 |
| (2,633) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HA | 39 | 0.11 |
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 23 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,630) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 30 | 0.11 |
| (2,622) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 13 | 0.11 |
| (2,622) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 24 | 0.11 |
| (2,617) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:HE22 | 10 | 0.11 |
| (2,617) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:HE22 | 10 | 0.11 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 16 | 0.11 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 17 | 0.11 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 18 | 0.11 |
| (2,616) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 19 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 1 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 1 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 1 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 6 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 6 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 6 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 8 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 8 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 8 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 9 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 9 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 9 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 10 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 10 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 10 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 14 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 14 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 14 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 15 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 15 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 15 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 19 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 19 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 19 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 22 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 22 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 22 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 25 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 25 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 25 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 26 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 26 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 26 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 27 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 27 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 27 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 32 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 32 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 32 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 34 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 34 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 34 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 37 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 37 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 37 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 40 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 40 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 40 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 41 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 41 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 41 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 42 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 42 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 42 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 43 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 43 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 43 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 44 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 44 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 44 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 46 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 46 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 46 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 49 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 49 | 0.11 |
| (2,614) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 49 | 0.11 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 24 | 0.11 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 39 | 0.11 |
| (2,612) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 42 | 0.11 |
| (2,609) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 3 | 0.11 |
| (2,609) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 25 | 0.11 |
| (2,609) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 26 | 0.11 |
| (2,609) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 40 | 0.11 |
| (2,607) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 4 | 0.11 |
| (2,605) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 31 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 28 | 0.11 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 28 | 0.11 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 33 | 0.11 |
| (2,602) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 33 | 0.11 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 47 | 0.11 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 47 | 0.11 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 49 | 0.11 |
| (2,587) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 49 | 0.11 |
| (2,582) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 37 | 0.11 |
| (2,564) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 37 | 0.11 |
| (2,564) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 37 | 0.11 |
| (2,564) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 37 | 0.11 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 3 | 0.11 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 3 | 0.11 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 3 | 0.11 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 8 | 0.11 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 8 | 0.11 |
| (2,563) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 8 | 0.11 |
| (2,557) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 7 | 0.11 |
| (2,553) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 18 | 0.11 |
| (2,550) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 28 | 0.11 |
| (2,550) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 41 | 0.11 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 38 | 0.11 |
| (2,541) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 48 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 1 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 1 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 1 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 2 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 2 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 2 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 3 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 3 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 3 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 6 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 6 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 6 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 7 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 7 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 7 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 8 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 8 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 8 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|--------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 9 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 9 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 9 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 10 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 10 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 10 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 11 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 11 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 11 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 13 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 13 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 13 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 14 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 14 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 14 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 15 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 15 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 15 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 16 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 16 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 16 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 17 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 17 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 17 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 18 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 18 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 18 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 19 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 19 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 19 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 20 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 20 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 20 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 21 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 21 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 21 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 22 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 22 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 22 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 23 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 23 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 23 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|--------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 24 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 24 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 24 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 25 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 25 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 25 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 26 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 26 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 26 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 27 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 27 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 27 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 28 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 28 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 28 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 29 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 29 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 29 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 31 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 31 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 31 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 32 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 32 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 32 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 33 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 33 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 33 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 34 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 34 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 34 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 35 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 35 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 35 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 36 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 36 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 36 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 37 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 37 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 37 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 38 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 38 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 38 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 40 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 40 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 40 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 41 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 41 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 41 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 42 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 42 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 42 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 43 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 43 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 43 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 44 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 44 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 44 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 45 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 45 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 45 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 46 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 46 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 46 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 47 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 47 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 47 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 48 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 48 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 48 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 49 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 49 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 49 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 50 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 50 | 0.11 |
| (2,54) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 50 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 2 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 2 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 2 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 3 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 3 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 3 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 5 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 5 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 5 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 11 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 11 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 11 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 12 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 12 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 12 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 14 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 14 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 14 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 16 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 16 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 16 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 17 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 17 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 17 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 19 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 19 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 19 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 20 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 20 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 20 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 22 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 22 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 22 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 24 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 24 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 24 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 26 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 26 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 26 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 27 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 27 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 27 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 29 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 29 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 29 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 30 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 30 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 30 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 32 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 32 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 32 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 33 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 33 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 33 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 36 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 36 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 36 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 38 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 38 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 38 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 40 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 40 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 40 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 47 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 47 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 47 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 49 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 49 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 49 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 50 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 50 | 0.11 |
| (2,535) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 50 | 0.11 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 22 | 0.11 |
| (2,532) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 22 | 0.11 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 30 | 0.11 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 30 | 0.11 |
| (2,523) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 30 | 0.11 |
| (2,50) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB2 | 46 | 0.11 |
| (2,496) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 2 | 0.11 |
| (2,496) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 9 | 0.11 |
| (2,496) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 22 | 0.11 |
| (2,496) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 25 | 0.11 |
| (2,496) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 30 | 0.11 |
| (2,496) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 41 | 0.11 |
| (2,496) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 46 | 0.11 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 5 | 0.11 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 5 | 0.11 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 28 | 0.11 |
| (2,493) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 28 | 0.11 |
| (2,48) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:H | 29 | 0.11 |
| (2,478) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 1 | 0.11 |
| (2,478) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 10 | 0.11 |
| (2,478) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 11 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,478) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 13 | 0.11 |
| (2,478) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 15 | 0.11 |
| (2,478) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 33 | 0.11 |
| (2,476) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 7 | 0.11 |
| (2,476) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 28 | 0.11 |
| (2,476) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 50 | 0.11 |
| (2,47) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 7 | 0.11 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 35 | 0.11 |
| (2,465) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 35 | 0.11 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 22 | 0.11 |
| (2,464) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 22 | 0.11 |
| (2,461) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 3 | 0.11 |
| (2,461) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 32 | 0.11 |
| (2,455) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:32:ARG:H | 39 | 0.11 |
| (2,45) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 2 | 0.11 |
| (2,45) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 48 | 0.11 |
| (2,445) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 15 | 0.11 |
| (2,445) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 28 | 0.11 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 5 | 0.11 |
| (2,444) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 24 | 0.11 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.11 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.11 |
| (2,438) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.11 |
| (2,436) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 4 | 0.11 |
| (2,434) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 4 | 0.11 |
| (2,431) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 20 | 0.11 |
| (2,429) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HA | 37 | 0.11 |
| (2,429) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HA | 39 | 0.11 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 30 | 0.11 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 30 | 0.11 |
| (2,421) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 30 | 0.11 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 23 | 0.11 |
| (2,405) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 30 | 0.11 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 8 | 0.11 |
| (2,396) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 50 | 0.11 |
| (2,395) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 4 | 0.11 |
| (2,395) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 8 | 0.11 |
| (2,395) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 14 | 0.11 |
| (2,395) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 16 | 0.11 |
| (2,395) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 28 | 0.11 |
| (2,393) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:31:GLU:H | 44 | 0.11 |
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 15 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,39) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 48 | 0.11 |
| (2,385) | 1:A:27:CYS:H | 1:A:28:SER:H | 18 | 0.11 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 8 | 0.11 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 8 | 0.11 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 26 | 0.11 |
| (2,38) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 26 | 0.11 |
| (2,376) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 9 | 0.11 |
| (2,37) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:HE22 | 10 | 0.11 |
| (2,37) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:HE22 | 10 | 0.11 |
| (2,368) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 6 | 0.11 |
| (2,368) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 19 | 0.11 |
| (2,368) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 21 | 0.11 |
| (2,368) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 26 | 0.11 |
| (2,368) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 27 | 0.11 |
| (2,368) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 30 | 0.11 |
| (2,368) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 39 | 0.11 |
| (2,368) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 45 | 0.11 |
| (2,36) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 3 | 0.11 |
| (2,36) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 25 | 0.11 |
| (2,36) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 26 | 0.11 |
| (2,36) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 40 | 0.11 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.11 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.11 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 16 | 0.11 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 16 | 0.11 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 24 | 0.11 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 24 | 0.11 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 33 | 0.11 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 33 | 0.11 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 46 | 0.11 |
| (2,357) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 46 | 0.11 |
| (2,353) | 1:A:24:TYR:HA | 1:A:28:SER:H | 33 | 0.11 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 10 | 0.11 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 18 | 0.11 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 20 | 0.11 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.11 |
| (2,346) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 50 | 0.11 |
| (2,344) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 35 | 0.11 |
| (2,341) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 25 | 0.11 |
| (2,341) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 26 | 0.11 |
| (2,341) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 48 | 0.11 |
| (2,33) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 15 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (2,33) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 31 | 0.11 |
| (2,324) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 31 | 0.11 |
| (2,315) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 37 | 0.11 |
| (2,314) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 13 | 0.11 |
| (2,314) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 19 | 0.11 |
| (2,314) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 24 | 0.11 |
| (2,314) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 38 | 0.11 |
| (2,314) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 42 | 0.11 |
| (2,312) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 3 | 0.11 |
| (2,312) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 3 | 0.11 |
| (2,312) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 41 | 0.11 |
| (2,312) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 41 | 0.11 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 17 | 0.11 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 17 | 0.11 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 22 | 0.11 |
| (2,311) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 22 | 0.11 |
| (2,309) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 18 | 0.11 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 30 | 0.11 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 30 | 0.11 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 44 | 0.11 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 44 | 0.11 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 49 | 0.11 |
| (2,308) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 49 | 0.11 |
| (2,3) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 2 | 0.11 |
| (2,3) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 10 | 0.11 |
| (2,3) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 11 | 0.11 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 24 | 0.11 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 39 | 0.11 |
| (2,289) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 42 | 0.11 |
| (2,28) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:4:GLN:H | 50 | 0.11 |
| (2,28) | 1:A:4:GLN:HB3 | 1:A:4:GLN:H | 50 | 0.11 |
| (2,271) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 2 | 0.11 |
| (2,271) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 9 | 0.11 |
| (2,271) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 22 | 0.11 |
| (2,271) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 25 | 0.11 |
| (2,271) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 30 | 0.11 |
| (2,271) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 41 | 0.11 |
| (2,271) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 46 | 0.11 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 12 | 0.11 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 19 | 0.11 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 26 | 0.11 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 32 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 46 | 0.11 |
| (2,267) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 50 | 0.11 |
| (2,255) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 18 | 0.11 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 28 | 0.11 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 28 | 0.11 |
| (2,25) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 28 | 0.11 |
| (2,246) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:H | 37 | 0.11 |
| (2,246) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:H | 37 | 0.11 |
| (2,246) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:H | 37 | 0.11 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 38 | 0.11 |
| (2,230) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 48 | 0.11 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 18 | 0.11 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 24 | 0.11 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 31 | 0.11 |
| (2,223) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 37 | 0.11 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 28 | 0.11 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 28 | 0.11 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 33 | 0.11 |
| (2,22) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 33 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 1 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 1 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 1 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 6 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 6 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 6 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 8 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 8 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 8 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 9 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 9 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 9 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 10 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 10 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 10 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 14 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 14 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 14 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 15 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 15 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 15 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 19 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 19 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 19 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 22 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 22 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 22 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 25 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 25 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 25 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 26 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 26 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 26 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 27 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 27 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 27 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 32 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 32 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 32 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 34 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 34 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 34 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 37 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 37 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 37 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 40 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 40 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 40 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 41 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 41 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 41 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 42 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 42 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 42 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 43 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 43 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 43 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 44 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 44 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 44 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 46 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 46 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 46 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 49 | 0.11 |
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 49 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,207) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 49 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 2 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 2 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 2 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 3 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 3 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 3 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 5 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 5 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 5 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 11 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 11 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 11 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 12 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 12 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 12 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 14 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 14 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 14 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 16 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 16 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 16 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 17 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 17 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 17 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 19 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 19 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 19 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 20 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 20 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 20 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 22 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 22 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 22 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 24 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 24 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 24 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 26 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 26 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 26 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 27 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 27 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 27 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 29 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 29 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 29 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 30 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 30 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 30 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 32 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 32 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 32 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 33 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 33 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 33 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 36 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 36 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 36 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 38 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 38 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 38 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 40 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 40 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 40 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 47 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 47 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 47 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 49 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 49 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 49 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 50 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 50 | 0.11 |
| (2,206) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 50 | 0.11 |
| (2,196) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 46 | 0.11 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 12 | 0.11 |
| (2,183) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 50 | 0.11 |
| (2,177) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 10 | 0.11 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 10 | 0.11 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 27 | 0.11 |
| (2,175) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 35 | 0.11 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 14 | 0.11 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 32 | 0.11 |
| (2,174) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 44 | 0.11 |
| (2,168) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 3 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (2,168) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 9 | 0.11 |
| (2,168) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 31 | 0.11 |
| (2,168) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 50 | 0.11 |
| (2,162) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 18 | 0.11 |
| (2,157) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 39 | 0.11 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 28 | 0.11 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 32 | 0.11 |
| (2,151) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 33 | 0.11 |
| (2,150) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 31 | 0.11 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 47 | 0.11 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 47 | 0.11 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 49 | 0.11 |
| (2,144) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 49 | 0.11 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 5 | 0.11 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 5 | 0.11 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 28 | 0.11 |
| (2,143) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 28 | 0.11 |
| (2,141) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 13 | 0.11 |
| (2,141) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 24 | 0.11 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 16 | 0.11 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 17 | 0.11 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 18 | 0.11 |
| (2,140) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 19 | 0.11 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (2,121) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (2,105) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HG3 | 49 | 0.11 |
| (2,105) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HG3 | 49 | 0.11 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB3 | 22 | 0.11 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB2 | 22 | 0.11 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB3 | 34 | 0.11 |
| (1,967) | 1:A:15:VAL:H | 1:A:14:ASN:HB2 | 34 | 0.11 |
| (1,922) | 1:A:4:GLN:HA | 1:A:4:GLN:HG2 | 11 | 0.11 |
| (1,922) | 1:A:4:GLN:HA | 1:A:4:GLN:HG3 | 11 | 0.11 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD11 | 9 | 0.11 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD12 | 9 | 0.11 |
| (1,911) | 1:A:9:CYS:HB2 | 1:A:30:LEU:HD13 | 9 | 0.11 |
| (1,903) | 1:A:11:GLU:HA | 1:A:11:GLU:HG3 | 39 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 17 | 0.11 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 17 | 0.11 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:HG2 | 22 | 0.11 |
| (1,891) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:HG2 | 22 | 0.11 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 4 | 0.11 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 4 | 0.11 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 25 | 0.11 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 25 | 0.11 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 31 | 0.11 |
| (1,888) | 1:A:7:LYS:HB3 | 1:A:8:TYR:H | 31 | 0.11 |
| (1,884) | 1:A:8:TYR:HE1 | 1:A:12:GLN:HG3 | 49 | 0.11 |
| (1,884) | 1:A:8:TYR:HE2 | 1:A:12:GLN:HG3 | 49 | 0.11 |
| (1,883) | 1:A:8:TYR:HB2 | 1:A:8:TYR:H | 14 | 0.11 |
| (1,878) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 3 | 0.11 |
| (1,878) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 9 | 0.11 |
| (1,878) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 31 | 0.11 |
| (1,878) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:12:GLN:H | 50 | 0.11 |
| (1,874) | 1:A:18:VAL:HG11 | 1:A:18:VAL:H | 37 | 0.11 |
| (1,874) | 1:A:18:VAL:HG12 | 1:A:18:VAL:H | 37 | 0.11 |
| (1,874) | 1:A:18:VAL:HG13 | 1:A:18:VAL:H | 37 | 0.11 |
| (1,872) | 1:A:12:GLN:H | 1:A:13:CYS:H | 10 | 0.11 |
| (1,866) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 15 | 0.11 |
| (1,866) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 31 | 0.11 |
| (1,855) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 13 | 0.11 |
| (1,855) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 19 | 0.11 |
| (1,855) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 24 | 0.11 |
| (1,855) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 38 | 0.11 |
| (1,855) | 1:A:22:GLN:H | 1:A:23:CYS:H | 42 | 0.11 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 12 | 0.11 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 19 | 0.11 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 26 | 0.11 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 32 | 0.11 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 46 | 0.11 |
| (1,850) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:20:PHE:H | 50 | 0.11 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 28 | 0.11 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 28 | 0.11 |
| (1,847) | 1:A:3:PRO:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 28 | 0.11 |
| (1,841) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:22:GLN:HG3 | 18 | 0.11 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 18 | 0.11 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 24 | 0.11 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 31 | 0.11 |
| (1,840) | 1:A:16:ASN:H | 1:A:16:ASN:HA | 37 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 30 | 0.11 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 30 | 0.11 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 44 | 0.11 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 44 | 0.11 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:22:GLN:H | 49 | 0.11 |
| (1,838) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:22:GLN:H | 49 | 0.11 |
| (1,837) | 1:A:31:GLU:H | 1:A:32:ARG:H | 39 | 0.11 |
| (1,835) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 2 | 0.11 |
| (1,835) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:6:ALA:H | 48 | 0.11 |
| (1,825) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:24:TYR:H | 31 | 0.11 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 8 | 0.11 |
| (1,817) | 1:A:29:PRO:HD3 | 1:A:28:SER:H | 50 | 0.11 |
| (1,816) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 25 | 0.11 |
| (1,816) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 26 | 0.11 |
| (1,816) | 1:A:24:TYR:HB2 | 1:A:24:TYR:H | 48 | 0.11 |
| (1,811) | 1:A:4:GLN:HB2 | 1:A:4:GLN:H | 50 | 0.11 |
| (1,811) | 1:A:4:GLN:HB3 | 1:A:4:GLN:H | 50 | 0.11 |
| (1,792) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 2 | 0.11 |
| (1,792) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 10 | 0.11 |
| (1,792) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:2:SER:H | 11 | 0.11 |
| (1,790) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 3 | 0.11 |
| (1,790) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 3 | 0.11 |
| (1,790) | 1:A:22:GLN:HB3 | 1:A:23:CYS:H | 41 | 0.11 |
| (1,790) | 1:A:22:GLN:HB2 | 1:A:23:CYS:H | 41 | 0.11 |
| (1,786) | 1:A:27:CYS:H | 1:A:28:SER:H | 18 | 0.11 |
| (1,784) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:31:GLU:H | 44 | 0.11 |
| (1,774) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB2 | 46 | 0.11 |
| (1,770) | 1:A:24:TYR:HA | 1:A:28:SER:H | 33 | 0.11 |
| (1,769) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 3 | 0.11 |
| (1,769) | 1:A:32:ARG:HB2 | 1:A:32:ARG:H | 32 | 0.11 |
| (1,763) | 1:A:26:MET:H | 1:A:27:CYS:H | 9 | 0.11 |
| (1,752) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:H | 29 | 0.11 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.11 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 4 | 0.11 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 16 | 0.11 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 16 | 0.11 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 24 | 0.11 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 24 | 0.11 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 33 | 0.11 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 33 | 0.11 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB2 | 1:A:25:GLN:H | 46 | 0.11 |
| (1,735) | 1:A:25:GLN:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 46 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|---------------|----------|---------------|
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 28 | 0.11 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 32 | 0.11 |
| (1,726) | 1:A:11:GLU:HG3 | 1:A:11:GLU:H | 33 | 0.11 |
| (1,725) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 6 | 0.11 |
| (1,725) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 19 | 0.11 |
| (1,725) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 21 | 0.11 |
| (1,725) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 26 | 0.11 |
| (1,725) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 27 | 0.11 |
| (1,725) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 30 | 0.11 |
| (1,725) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 39 | 0.11 |
| (1,725) | 1:A:26:MET:HB2 | 1:A:26:MET:HA | 45 | 0.11 |
| (1,723) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:H | 4 | 0.11 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 12 | 0.11 |
| (1,708) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:12:GLN:H | 50 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 1 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 2 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 2 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 3 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 6 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 6 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 7 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 7 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 7 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 8 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 8 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 9 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 9 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 10 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 10 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 10 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 11 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 11 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 13 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 13 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 14 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 14 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 14 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 15 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 15 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 16 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 17 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 17 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 18 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 18 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 19 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 19 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 19 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 20 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 21 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 21 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 21 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 22 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 22 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 22 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 23 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 23 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 23 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 24 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 24 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 24 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 25 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 25 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 25 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 26 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 26 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 26 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 27 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 27 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 27 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 28 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 28 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 28 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 29 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 29 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 29 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 31 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 31 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 31 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 32 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 32 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 32 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 33 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 33 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 33 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 34 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 34 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 34 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 35 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 35 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 35 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 36 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 36 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 36 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 37 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 37 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 37 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 38 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 38 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 38 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 40 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 40 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 40 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 41 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 41 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 41 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 42 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 42 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 42 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 43 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 43 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 43 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 44 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 44 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 44 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 45 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 45 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 45 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 46 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 46 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 46 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 47 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 47 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 47 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 48 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 48 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 48 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 49 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 49 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 49 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB1 | 50 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB2 | 50 | 0.11 |
| (1,706) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:6:ALA:HB3 | 50 | 0.11 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:H | 35 | 0.11 |
| (1,695) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:H | 35 | 0.11 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 10 | 0.11 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 18 | 0.11 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 20 | 0.11 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 27 | 0.11 |
| (1,694) | 1:A:24:TYR:H | 1:A:25:GLN:H | 50 | 0.11 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 15 | 0.11 |
| (1,680) | 1:A:5:GLN:HB2 | 1:A:5:GLN:H | 48 | 0.11 |
| (1,679) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 15 | 0.11 |
| (1,679) | 1:A:31:GLU:HG3 | 1:A:31:GLU:H | 28 | 0.11 |
| (1,673) | 1:A:12:GLN:HB2 | 1:A:12:GLN:H | 18 | 0.11 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.11 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.11 |
| (1,667) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 48 | 0.11 |
| (1,666) | 1:A:13:CYS:HB2 | 1:A:23:CYS:HB2 | 46 | 0.11 |
| (1,665) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 4 | 0.11 |
| (1,665) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 8 | 0.11 |
| (1,665) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 14 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,665) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 16 | 0.11 |
| (1,665) | 1:A:29:PRO:HD2 | 1:A:28:SER:HA | 28 | 0.11 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 10 | 0.11 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 27 | 0.11 |
| (1,655) | 1:A:12:GLN:HG3 | 1:A:13:CYS:H | 35 | 0.11 |
| (1,647) | 1:A:24:TYR:HB3 | 1:A:25:GLN:H | 35 | 0.11 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 14 | 0.11 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 32 | 0.11 |
| (1,645) | 1:A:12:GLN:HG2 | 1:A:13:CYS:H | 44 | 0.11 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 8 | 0.11 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 8 | 0.11 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:H | 26 | 0.11 |
| (1,632) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:H | 26 | 0.11 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 5 | 0.11 |
| (1,631) | 1:A:31:GLU:HB3 | 1:A:31:GLU:H | 24 | 0.11 |
| (1,628) | 1:A:30:LEU:HA | 1:A:30:LEU:HG | 20 | 0.11 |
| (1,614) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HA | 37 | 0.11 |
| (1,614) | 1:A:30:LEU:HB2 | 1:A:30:LEU:HA | 39 | 0.11 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 23 | 0.11 |
| (1,611) | 1:A:29:PRO:HA | 1:A:29:PRO:HG3 | 30 | 0.11 |
| (1,605) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 13 | 0.11 |
| (1,605) | 1:A:10:TYR:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 24 | 0.11 |
| (1,600) | 1:A:5:GLN:HG3 | 1:A:5:GLN:HE22 | 10 | 0.11 |
| (1,600) | 1:A:5:GLN:HG2 | 1:A:5:GLN:HE22 | 10 | 0.11 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 16 | 0.11 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 17 | 0.11 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 18 | 0.11 |
| (1,599) | 1:A:10:TYR:H | 1:A:11:GLU:H | 19 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 1 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 1 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 1 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 6 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 6 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 6 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 9 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 9 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 9 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 10 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 10 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 10 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 14 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 14 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 14 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 15 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 15 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 15 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 19 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 19 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 19 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 22 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 22 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 22 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 25 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 25 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 25 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 26 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 26 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 26 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 27 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 27 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 27 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 32 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 32 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 32 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 34 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 34 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 34 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 37 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 37 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 37 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 40 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 40 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 40 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 41 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 41 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 41 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 42 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 42 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 42 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 43 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 43 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 43 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 44 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 44 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 44 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 46 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 46 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 46 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG21 | 49 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG22 | 49 | 0.11 |
| (1,597) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG23 | 49 | 0.11 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 24 | 0.11 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 39 | 0.11 |
| (1,595) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:21:ASP:H | 42 | 0.11 |
| (1,592) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 3 | 0.11 |
| (1,592) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 25 | 0.11 |
| (1,592) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 26 | 0.11 |
| (1,592) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:H | 40 | 0.11 |
| (1,590) | 1:A:30:LEU:H | 1:A:31:GLU:H | 4 | 0.11 |
| (1,588) | 1:A:11:GLU:HB2 | 1:A:11:GLU:H | 31 | 0.11 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 28 | 0.11 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 28 | 0.11 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:4:GLN:H | 33 | 0.11 |
| (1,585) | 1:A:3:PRO:HD2 | 1:A:4:GLN:H | 33 | 0.11 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 47 | 0.11 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 47 | 0.11 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HA | 49 | 0.11 |
| (1,571) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HA | 49 | 0.11 |
| (1,566) | 1:A:22:GLN:HA | 1:A:25:GLN:HG2 | 37 | 0.11 |
| (1,554) | 1:A:6:ALA:HB1 | 1:A:31:GLU:HG2 | 37 | 0.11 |
| (1,554) | 1:A:6:ALA:HB2 | 1:A:31:GLU:HG2 | 37 | 0.11 |
| (1,554) | 1:A:6:ALA:HB3 | 1:A:31:GLU:HG2 | 37 | 0.11 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 3 | 0.11 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 3 | 0.11 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 3 | 0.11 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD11 | 8 | 0.11 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD12 | 8 | 0.11 |
| (1,553) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:30:LEU:HD13 | 8 | 0.11 |
| (1,547) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:8:TYR:HB3 | 7 | 0.11 |
| (1,543) | 1:A:19:PRO:HB3 | 1:A:19:PRO:HD3 | 18 | 0.11 |
| (1,540) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 28 | 0.11 |
| (1,540) | 1:A:3:PRO:HD3 | 1:A:2:SER:HA | 41 | 0.11 |
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 38 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,531) | 1:A:17:LYS:HB2 | 1:A:17:LYS:HD2 | 48 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 2 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 2 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 2 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 3 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 3 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 3 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 5 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 5 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 5 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 11 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 11 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 11 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 12 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 12 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 12 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 14 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 14 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 14 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 16 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 16 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 16 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 17 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 17 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 17 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 19 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 19 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 19 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 20 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 20 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 20 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 22 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 22 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 22 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 24 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 24 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 24 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 26 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 26 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 26 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 27 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 27 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 27 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 29 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 29 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 29 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 30 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 30 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 30 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 32 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 32 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 32 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 33 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 33 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 33 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 36 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 36 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 36 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 38 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 38 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 38 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 40 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 40 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 40 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 47 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 47 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 47 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 49 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 49 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 49 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG11 | 50 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG12 | 50 | 0.11 |
| (1,525) | 1:A:15:VAL:HB | 1:A:15:VAL:HG13 | 50 | 0.11 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB3 | 1:A:33:SER:HA | 22 | 0.11 |
| (1,522) | 1:A:33:SER:HB2 | 1:A:33:SER:HA | 22 | 0.11 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD11 | 30 | 0.11 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD12 | 30 | 0.11 |
| (1,513) | 1:A:30:LEU:HB3 | 1:A:30:LEU:HD13 | 30 | 0.11 |
| (1,486) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 2 | 0.11 |
| (1,486) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 9 | 0.11 |
| (1,486) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 22 | 0.11 |
| (1,486) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 25 | 0.11 |
| (1,486) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 30 | 0.11 |
| (1,486) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 41 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,486) | 1:A:20:PHE:HB2 | 1:A:20:PHE:HA | 46 | 0.11 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:24:TYR:HB2 | 28 | 0.11 |
| (1,483) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:24:TYR:HB2 | 28 | 0.11 |
| (1,468) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 1 | 0.11 |
| (1,468) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 10 | 0.11 |
| (1,468) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 11 | 0.11 |
| (1,468) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 13 | 0.11 |
| (1,468) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 15 | 0.11 |
| (1,468) | 1:A:7:LYS:HE2 | 1:A:7:LYS:HD3 | 33 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 7 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 28 | 0.11 |
| (1,466) | 1:A:7:LYS:HG2 | 1:A:7:LYS:HE2 | 50 | 0.11 |
| (1,420) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:29:PRO:HD3 | 5 | 0.11 |
| (1,420) | 1:A:28:SER:HA | 1:A:29:PRO:HD3 | 33 | 0.11 |
| (1,414) | 1:A:2:SER:HB3 | 1:A:5:GLN:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 23 | 0.11 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 23 | 0.11 |
| (1,409) | 1:A:18:VAL:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 23 | 0.11 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:30:LEU:H | 4 | 0.11 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:30:LEU:H | 4 | 0.11 |
| (1,389) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:30:LEU:H | 4 | 0.11 |
| (1,378) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 31 | 0.11 |
| (1,378) | 1:A:25:GLN:HG2 | 1:A:25:GLN:H | 48 | 0.11 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 5 | 0.11 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 5 | 0.11 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 6 | 0.11 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 6 | 0.11 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 7 | 0.11 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 7 | 0.11 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 13 | 0.11 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 13 | 0.11 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 16 | 0.11 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 16 | 0.11 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 21 | 0.11 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 21 | 0.11 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 24 | 0.11 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 24 | 0.11 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 28 | 0.11 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 28 | 0.11 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 47 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|----------------|----------|---------------|
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 47 | 0.11 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD1 | 49 | 0.11 |
| (1,366) | 1:A:20:PHE:H | 1:A:20:PHE:HD2 | 49 | 0.11 |
| (1,348) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 16 | 0.11 |
| (1,348) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 24 | 0.11 |
| (1,348) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 28 | 0.11 |
| (1,348) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 30 | 0.11 |
| (1,348) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 37 | 0.11 |
| (1,348) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:12:GLN:HG2 | 45 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 7 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 8 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 10 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 11 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 12 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 14 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 17 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 19 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 21 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 22 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 23 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 24 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 25 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 26 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 27 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 28 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 29 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 30 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 31 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 32 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 33 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 34 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 35 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 36 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 38 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 40 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 41 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 43 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 44 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 45 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 46 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 47 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 48 | 0.11 |
| (1,345) | 1:A:30:LEU:HG | 1:A:30:LEU:HB3 | 50 | 0.11 |
| (1,294) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:10:TYR:HA | 1 | 0.11 |
| (1,294) | 1:A:13:CYS:H | 1:A:10:TYR:HA | 19 | 0.11 |
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 16 | 0.11 |
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 20 | 0.11 |
| (1,269) | 1:A:7:LYS:H | 1:A:5:GLN:HA | 34 | 0.11 |
| (1,268) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:5:GLN:HG3 | 5 | 0.11 |
| (1,262) | 1:A:5:GLN:H | 1:A:4:GLN:HG3 | 32 | 0.11 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,256) | 1:A:6:ALA:H | 1:A:5:GLN:HB3 | 47 | 0.11 |
| (1,206) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:21:ASP:HB2 | 10 | 0.11 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 9 | 0.11 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 12 | 0.11 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 13 | 0.11 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 15 | 0.11 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 16 | 0.11 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 18 | 0.11 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 30 | 0.11 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 33 | 0.11 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 39 | 0.11 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 41 | 0.11 |
| (1,2) | 1:A:3:PRO:HB2 | 1:A:3:PRO:HA | 48 | 0.11 |
| (1,193) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG22 | 40 | 0.11 |
| (1,193) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG21 | 40 | 0.11 |
| (1,193) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG23 | 40 | 0.11 |
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD2 | 1:A:21:ASP:HA | 7 | 0.11 |
| (1,188) | 1:A:24:TYR:HD1 | 1:A:21:ASP:HA | 7 | 0.11 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG22 | 38 | 0.11 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG21 | 38 | 0.11 |
| (1,187) | 1:A:19:PRO:HB2 | 1:A:18:VAL:HG23 | 38 | 0.11 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 41 | 0.11 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 41 | 0.11 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 41 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG22 | 48 | 0.11 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG21 | 48 | 0.11 |
| (1,185) | 1:A:23:CYS:HB3 | 1:A:18:VAL:HG23 | 48 | 0.11 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG22 | 1:A:14:ASN:HB3 | 29 | 0.11 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG21 | 1:A:14:ASN:HB3 | 29 | 0.11 |
| (1,179) | 1:A:18:VAL:HG23 | 1:A:14:ASN:HB3 | 29 | 0.11 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG11 | 33 | 0.11 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG13 | 33 | 0.11 |
| (1,178) | 1:A:13:CYS:HA | 1:A:18:VAL:HG12 | 33 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:10:TYR:HA | 6 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:10:TYR:HA | 6 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:10:TYR:HE1 | 1:A:10:TYR:HA | 11 | 0.11 |
| (1,175) | 1:A:10:TYR:HE2 | 1:A:10:TYR:HA | 11 | 0.11 |
| (1,174) | 1:A:10:TYR:HA | 1:A:13:CYS:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 2 | 0.11 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 4 | 0.11 |
| (1,156) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HA | 30 | 0.11 |
| (1,151) | 1:A:8:TYR:HA | 1:A:11:GLU:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,146) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HG11 | 13 | 0.11 |
| (1,146) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HG13 | 13 | 0.11 |
| (1,146) | 1:A:19:PRO:HD2 | 1:A:18:VAL:HG12 | 13 | 0.11 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 15 | 0.11 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:29:PRO:HG3 | 15 | 0.11 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG3 | 15 | 0.11 |
| (1,1040) | 1:A:32:ARG:HB3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 15 | 0.11 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HB2 | 1:A:32:ARG:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,1040) | 1:A:29:PRO:HG3 | 1:A:32:ARG:HG2 | 15 | 0.11 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HG2 | 38 | 0.11 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HG2 | 38 | 0.11 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HG2 | 38 | 0.11 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD11 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.11 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD12 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.11 |
| (1,1026) | 1:A:30:LEU:HD13 | 1:A:31:GLU:HB2 | 38 | 0.11 |
| (1,1022) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG2 | 47 | 0.11 |
| (1,1022) | 1:A:5:GLN:HA | 1:A:5:GLN:HG3 | 47 | 0.11 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG2 | 1:A:32:ARG:HA | 2 | 0.11 |
| (1,1018) | 1:A:32:ARG:HG3 | 1:A:32:ARG:HA | 2 | 0.11 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:H | 5 | 0.11 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 5 | 0.11 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB3 | 1:A:14:ASN:H | 16 | 0.11 |
| (1,1004) | 1:A:14:ASN:HB2 | 1:A:14:ASN:H | 16 | 0.11 |
| (1,1000) | 1:A:9:CYS:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 1 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1000) | 1:A:6:ALA:HA | 1:A:9:CYS:HB3 | 1 | 0.11 |

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

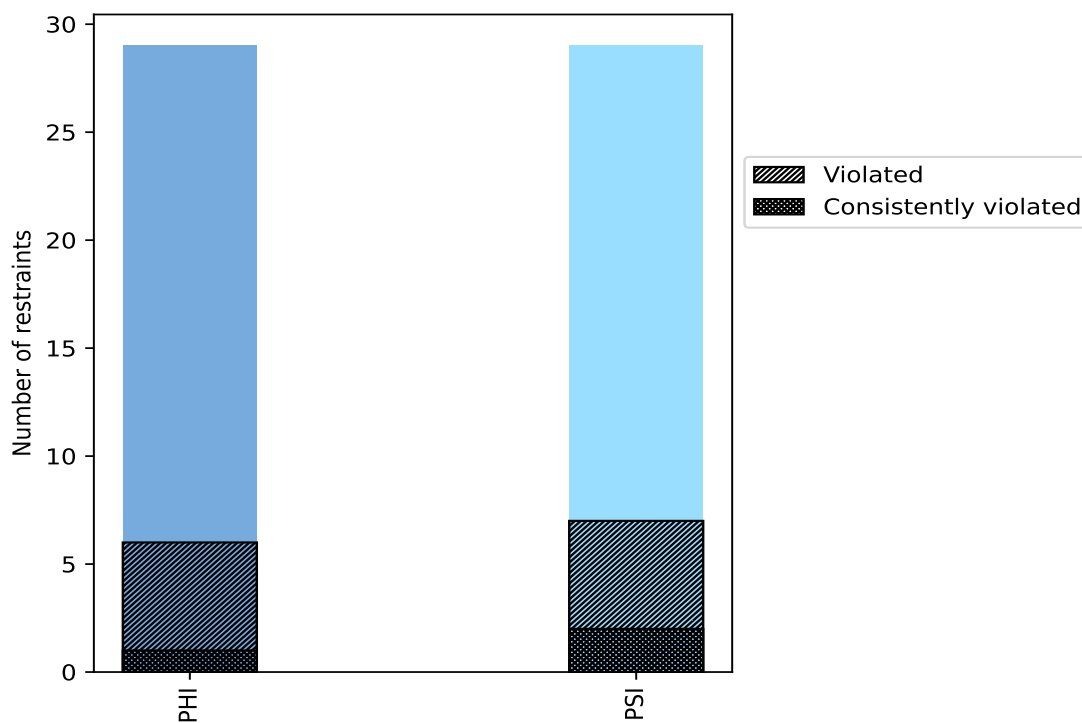
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

The following table provides the summary of dihedral-angle violations in different dihedral-angle types. Violations less than 1° are not included in the calculation.

| Angle type | Count | % ¹ | Violated ³ | | | Consistently Violated ⁴ | | |
|------------|-------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
| | | | Count | % ² | % ¹ | Count | % ² | % ¹ |
| PHI | 29 | 50.0 | 6 | 20.7 | 10.3 | 1 | 3.4 | 1.7 |
| PSI | 29 | 50.0 | 7 | 24.1 | 12.1 | 2 | 6.9 | 3.4 |
| Total | 58 | 100.0 | 13 | 22.4 | 22.4 | 3 | 5.2 | 5.2 |

¹ percentage calculated with respect to total number of dihedral-angle restraints, ² percentage calculated with respect to number of restraints in a particular dihedral-angle type, ³ violated in at least one model, ⁴ violated in all the models

10.1.1 Bar chart : Distribution of dihedral-angles and violations [i](#)



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

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

The following table provides the dihedral-angle violation statistics for each model in the ensemble. Violations less than 1° are not included in the statistics.

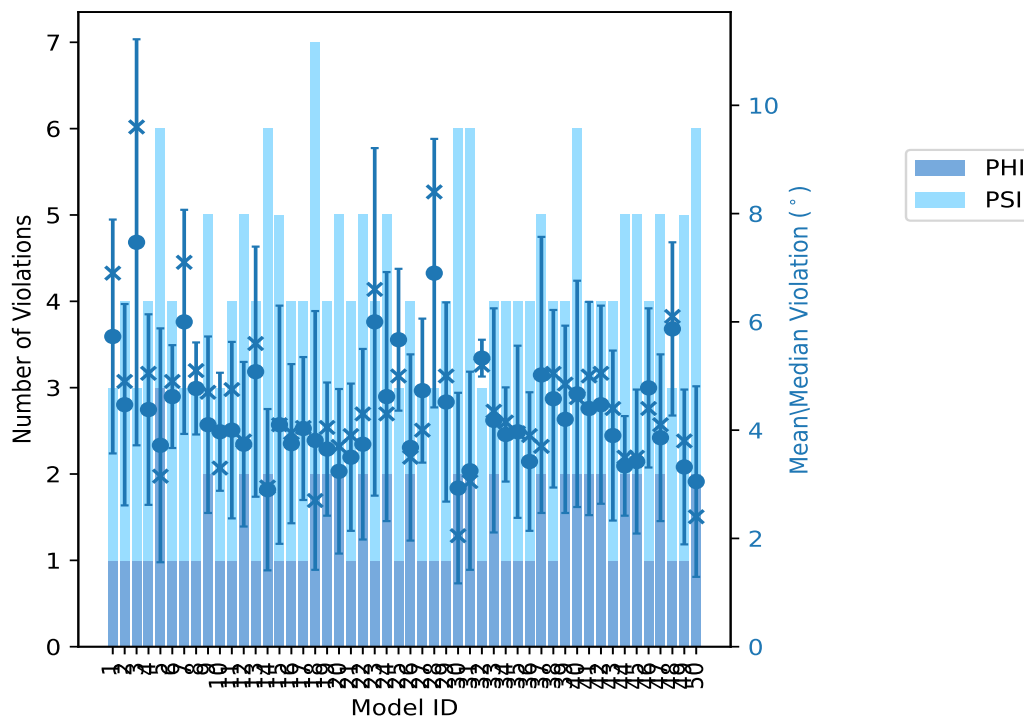
| Model ID | Number of violations | | | Mean (°) | Max (°) | SD (°) | Median (°) |
|----------|----------------------|-----|-------|----------|---------|--------|------------|
| | PHI | PSI | Total | | | | |
| 1 | 1 | 2 | 3 | 5.73 | 7.6 | 2.16 | 6.9 |
| 2 | 1 | 3 | 4 | 4.47 | 6.6 | 1.86 | 4.9 |
| 3 | 1 | 2 | 3 | 7.47 | 10.6 | 3.75 | 9.6 |
| 4 | 1 | 3 | 4 | 4.38 | 6.0 | 1.76 | 5.05 |
| 5 | 3 | 3 | 6 | 3.72 | 7.1 | 2.16 | 3.15 |
| 6 | 1 | 3 | 4 | 4.62 | 5.6 | 0.95 | 4.9 |
| 7 | 1 | 2 | 3 | 6.0 | 7.8 | 2.07 | 7.1 |
| 8 | 1 | 2 | 3 | 4.77 | 5.6 | 0.85 | 5.1 |
| 9 | 2 | 3 | 5 | 4.1 | 6.4 | 1.63 | 4.7 |
| 10 | 1 | 2 | 3 | 3.97 | 5.5 | 1.09 | 3.3 |
| 11 | 1 | 3 | 4 | 4.0 | 5.3 | 1.63 | 4.75 |
| 12 | 2 | 3 | 5 | 3.74 | 6.1 | 1.52 | 3.8 |
| 13 | 1 | 3 | 4 | 5.08 | 7.4 | 2.31 | 5.6 |
| 14 | 2 | 4 | 6 | 2.9 | 4.7 | 1.49 | 2.95 |
| 15 | 1 | 4 | 5 | 4.1 | 6.7 | 2.2 | 4.1 |
| 16 | 1 | 3 | 4 | 3.75 | 5.5 | 1.47 | 3.95 |
| 17 | 1 | 3 | 4 | 4.03 | 5.6 | 1.32 | 4.05 |
| 18 | 2 | 5 | 7 | 3.81 | 8.3 | 2.39 | 2.7 |
| 19 | 2 | 2 | 4 | 3.65 | 4.9 | 1.23 | 4.05 |
| 20 | 2 | 3 | 5 | 3.24 | 4.8 | 1.52 | 3.7 |
| 21 | 1 | 3 | 4 | 3.5 | 4.8 | 1.36 | 3.9 |
| 22 | 2 | 3 | 5 | 3.74 | 5.6 | 1.76 | 4.3 |
| 23 | 1 | 3 | 4 | 6.0 | 9.1 | 3.21 | 6.6 |
| 24 | 2 | 3 | 5 | 4.62 | 7.6 | 2.3 | 4.3 |
| 25 | 1 | 2 | 3 | 5.67 | 7.5 | 1.31 | 5.0 |
| 26 | 2 | 2 | 4 | 3.68 | 6.1 | 1.72 | 3.5 |
| 27 | 1 | 2 | 3 | 4.73 | 6.6 | 1.33 | 4.0 |
| 28 | 1 | 2 | 3 | 6.9 | 8.9 | 2.48 | 8.4 |
| 29 | 1 | 3 | 4 | 4.52 | 6.4 | 1.84 | 5.0 |
| 30 | 2 | 4 | 6 | 2.93 | 5.7 | 1.76 | 2.05 |
| 31 | 2 | 4 | 6 | 3.25 | 6.1 | 1.83 | 3.05 |
| 32 | 1 | 2 | 3 | 5.33 | 5.8 | 0.34 | 5.2 |
| 33 | 2 | 2 | 4 | 4.18 | 6.9 | 2.07 | 4.35 |
| 34 | 1 | 3 | 4 | 3.92 | 4.8 | 0.87 | 4.15 |
| 35 | 1 | 3 | 4 | 3.97 | 5.8 | 1.59 | 3.95 |
| 36 | 1 | 3 | 4 | 3.42 | 4.6 | 1.28 | 3.9 |
| 37 | 2 | 3 | 5 | 5.02 | 8.3 | 2.55 | 3.7 |
| 38 | 1 | 3 | 4 | 4.58 | 6.3 | 1.64 | 5.05 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Model ID | Number of violations | | | Mean (°) | Max (°) | SD (°) | Median (°) |
|----------|----------------------|-----|-------|----------|---------|--------|------------|
| | PHI | PSI | Total | | | | |
| 39 | 2 | 2 | 4 | 4.2 | 5.8 | 1.73 | 4.85 |
| 40 | 2 | 4 | 6 | 4.67 | 7.4 | 2.09 | 4.6 |
| 41 | 2 | 2 | 4 | 4.4 | 6.3 | 1.97 | 5.0 |
| 42 | 2 | 2 | 4 | 4.47 | 6.3 | 1.83 | 5.05 |
| 43 | 1 | 3 | 4 | 3.9 | 5.5 | 1.57 | 4.4 |
| 44 | 2 | 3 | 5 | 3.34 | 4.6 | 0.92 | 3.5 |
| 45 | 2 | 3 | 5 | 3.42 | 5.4 | 1.33 | 3.5 |
| 46 | 1 | 3 | 4 | 4.78 | 6.9 | 1.47 | 4.4 |
| 47 | 2 | 3 | 5 | 3.86 | 6.3 | 1.54 | 4.1 |
| 48 | 1 | 2 | 3 | 5.87 | 7.7 | 1.6 | 6.1 |
| 49 | 1 | 4 | 5 | 3.32 | 4.9 | 1.43 | 3.8 |
| 50 | 2 | 4 | 6 | 3.05 | 5.7 | 1.76 | 2.4 |

10.2.1 Bar graph : Dihedral violation statistics for each model [i](#)



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

10.3 Dihedral-angle violation statistics for the ensemble [i](#)

Violation analysis may find that some restraints are violated in very few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of ensemble.

| Number of violated restraints | | | Fraction of the ensemble | |
|-------------------------------|-----|-------|--------------------------|------|
| PHI | PSI | Total | Count ¹ | % |
| 0 | 0 | 0 | 1 | 2.0 |
| 2 | 0 | 2 | 2 | 4.0 |
| 0 | 2 | 2 | 3 | 6.0 |
| 0 | 0 | 0 | 4 | 8.0 |
| 2 | 1 | 3 | 5 | 10.0 |
| 0 | 1 | 1 | 6 | 12.0 |
| 0 | 0 | 0 | 7 | 14.0 |
| 0 | 0 | 0 | 8 | 16.0 |
| 1 | 0 | 1 | 9 | 18.0 |
| 0 | 0 | 0 | 10 | 20.0 |
| 0 | 0 | 0 | 11 | 22.0 |
| 0 | 0 | 0 | 12 | 24.0 |
| 0 | 0 | 0 | 13 | 26.0 |
| 0 | 0 | 0 | 14 | 28.0 |
| 0 | 0 | 0 | 15 | 30.0 |
| 0 | 0 | 0 | 16 | 32.0 |
| 0 | 0 | 0 | 17 | 34.0 |
| 0 | 0 | 0 | 18 | 36.0 |
| 0 | 0 | 0 | 19 | 38.0 |
| 0 | 0 | 0 | 20 | 40.0 |
| 0 | 0 | 0 | 21 | 42.0 |
| 0 | 0 | 0 | 22 | 44.0 |
| 0 | 0 | 0 | 23 | 46.0 |
| 0 | 0 | 0 | 24 | 48.0 |
| 0 | 0 | 0 | 25 | 50.0 |
| 0 | 1 | 1 | 26 | 52.0 |
| 0 | 0 | 0 | 27 | 54.0 |
| 0 | 0 | 0 | 28 | 56.0 |
| 0 | 0 | 0 | 29 | 58.0 |
| 0 | 0 | 0 | 30 | 60.0 |
| 0 | 0 | 0 | 31 | 62.0 |
| 0 | 0 | 0 | 32 | 64.0 |
| 0 | 0 | 0 | 33 | 66.0 |
| 0 | 0 | 0 | 34 | 68.0 |
| 0 | 0 | 0 | 35 | 70.0 |
| 0 | 0 | 0 | 36 | 72.0 |
| 0 | 0 | 0 | 37 | 74.0 |

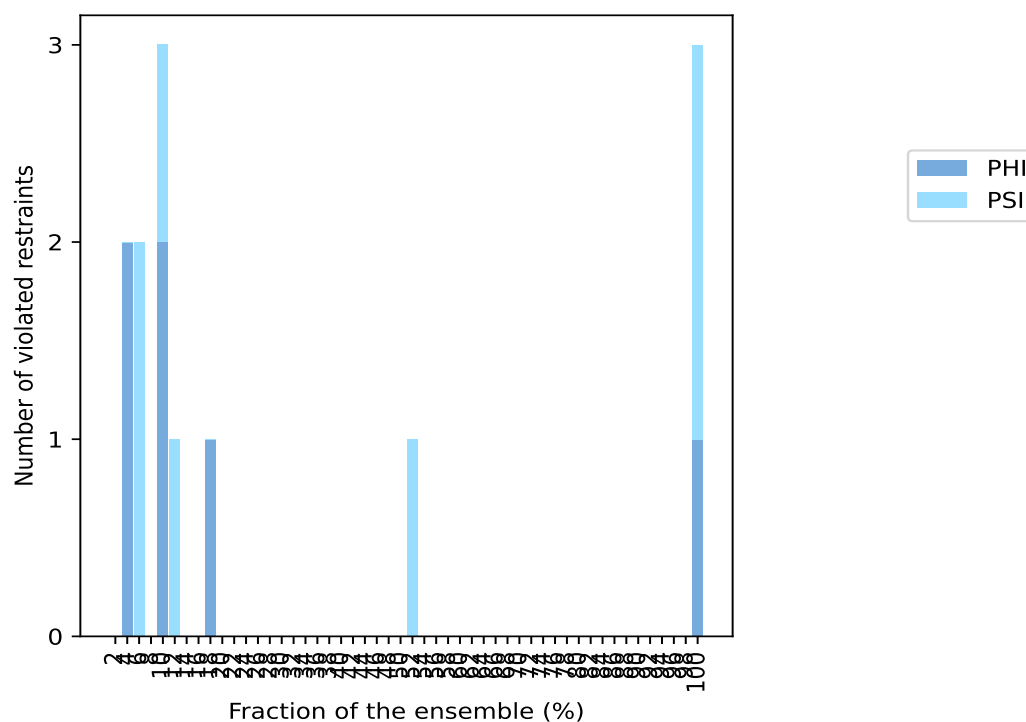
Continued on next page...

Continued from previous page...

| Number of violated restraints | | | Fraction of the ensemble | |
|-------------------------------|-----|-------|--------------------------|-------|
| PHI | PSI | Total | Count ¹ | % |
| 0 | 0 | 0 | 38 | 76.0 |
| 0 | 0 | 0 | 39 | 78.0 |
| 0 | 0 | 0 | 40 | 80.0 |
| 0 | 0 | 0 | 41 | 82.0 |
| 0 | 0 | 0 | 42 | 84.0 |
| 0 | 0 | 0 | 43 | 86.0 |
| 0 | 0 | 0 | 44 | 88.0 |
| 0 | 0 | 0 | 45 | 90.0 |
| 0 | 0 | 0 | 46 | 92.0 |
| 0 | 0 | 0 | 47 | 94.0 |
| 0 | 0 | 0 | 48 | 96.0 |
| 0 | 0 | 0 | 49 | 98.0 |
| 1 | 2 | 3 | 50 | 100.0 |

¹ Number of models with violations

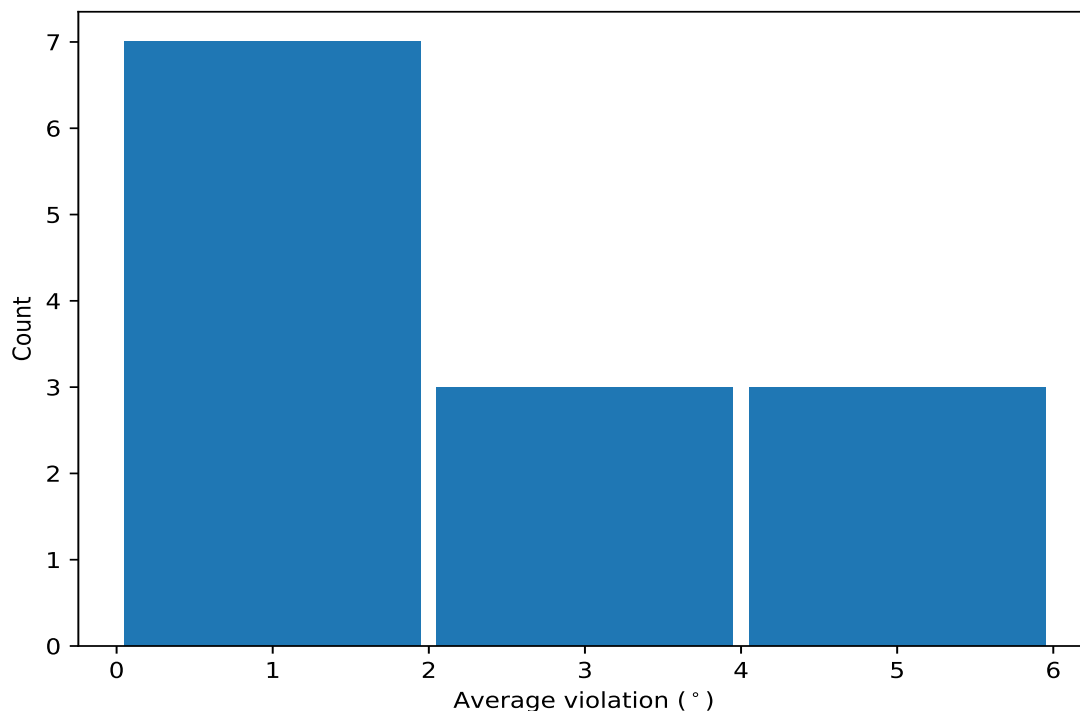
10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

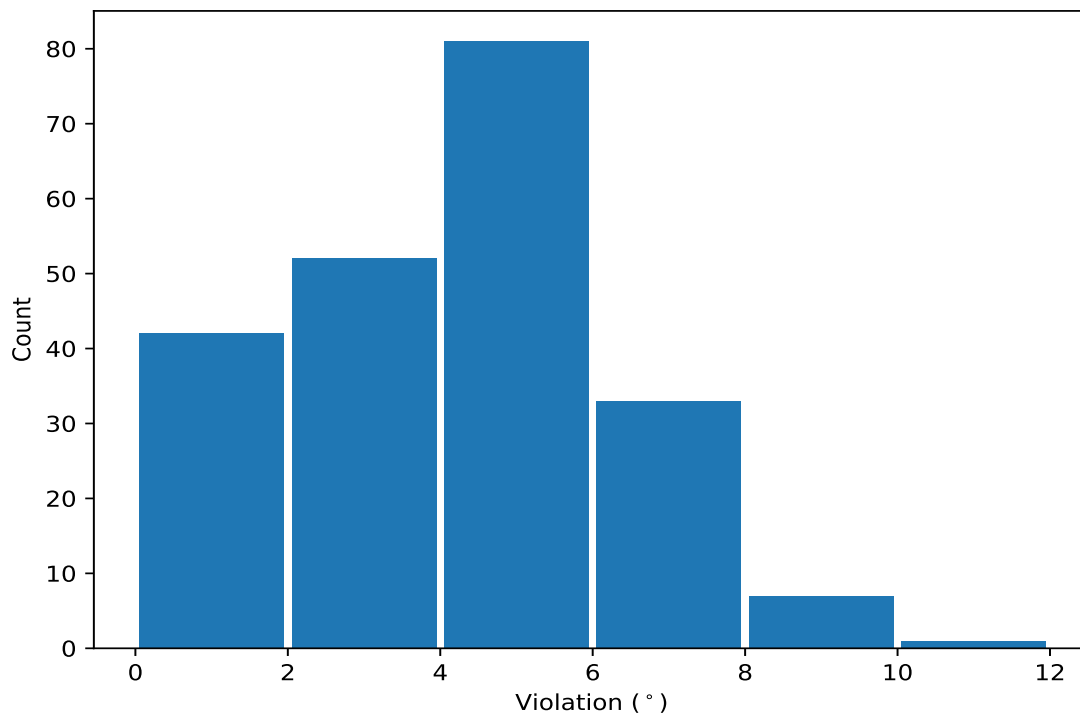
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Models ¹ | Mean | SD ² | Median |
|--------|--------------|---------------|---------------|--------------|---------------------|------|-----------------|--------|
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 50 | 5.77 | 1.67 | 5.45 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 50 | 5.1 | 1.65 | 4.8 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 50 | 4.72 | 1.1 | 4.65 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 26 | 2.03 | 0.64 | 1.9 |
| (2,47) | 1:A:25:GLN:C | 1:A:26:MET:N | 1:A:26:MET:CA | 1:A:26:MET:C | 9 | 1.49 | 0.32 | 1.6 |
| (2,58) | 1:A:31:GLU:N | 1:A:31:GLU:CA | 1:A:31:GLU:C | 1:A:32:ARG:N | 6 | 1.9 | 0.45 | 1.8 |
| (2,50) | 1:A:27:CYS:N | 1:A:27:CYS:CA | 1:A:27:CYS:C | 1:A:28:SER:N | 5 | 2.72 | 0.64 | 2.5 |
| (2,31) | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 1:A:18:VAL:CA | 1:A:18:VAL:C | 5 | 2.46 | 1.02 | 2.4 |
| (2,19) | 1:A:11:GLU:C | 1:A:12:GLN:N | 1:A:12:GLN:CA | 1:A:12:GLN:C | 5 | 1.48 | 0.21 | 1.5 |
| (2,20) | 1:A:12:GLN:N | 1:A:12:GLN:CA | 1:A:12:GLN:C | 1:A:13:CYS:N | 3 | 1.43 | 0.26 | 1.3 |
| (2,34) | 1:A:19:PRO:N | 1:A:19:PRO:CA | 1:A:19:PRO:C | 1:A:20:PHE:N | 3 | 1.43 | 0.21 | 1.4 |
| (2,57) | 1:A:30:LEU:C | 1:A:31:GLU:N | 1:A:31:GLU:CA | 1:A:31:GLU:C | 2 | 1.85 | 0.15 | 1.85 |
| (2,55) | 1:A:29:PRO:C | 1:A:30:LEU:N | 1:A:30:LEU:CA | 1:A:30:LEU:C | 2 | 1.5 | 0.2 | 1.5 |

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

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

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

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



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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 3 | 10.6 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 3 | 9.6 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 23 | 9.1 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 23 | 9.1 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 28 | 8.9 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 28 | 8.4 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 37 | 8.3 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 18 | 8.3 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 37 | 7.9 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 7 | 7.8 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 48 | 7.7 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1 | 7.6 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 24 | 7.6 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 25 | 7.5 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 13 | 7.4 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 40 | 7.4 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 7 | 7.1 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 5 | 7.1 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 13 | 7.0 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 24 | 6.9 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 33 | 6.9 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1 | 6.9 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 46 | 6.9 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 40 | 6.8 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 15 | 6.7 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 18 | 6.6 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 2 | 6.6 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 27 | 6.6 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 9 | 6.4 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 15 | 6.4 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 29 | 6.4 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 38 | 6.3 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 47 | 6.3 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 42 | 6.3 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 41 | 6.3 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 12 | 6.1 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 26 | 6.1 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 48 | 6.1 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 31 | 6.1 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 5 | 6.0 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 4 | 6.0 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 41 | 5.9 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 29 | 5.9 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 35 | 5.8 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 39 | 5.8 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 32 | 5.8 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 30 | 5.7 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 40 | 5.7 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 50 | 5.7 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 6 | 5.6 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 8 | 5.6 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 17 | 5.6 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 22 | 5.6 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 42 | 5.6 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 10 | 5.5 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 16 | 5.5 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 43 | 5.5 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 22 | 5.4 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 45 | 5.4 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 46 | 5.4 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 11 | 5.3 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 35 | 5.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 38 | 5.3 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 32 | 5.2 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 6 | 5.2 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 50 | 5.2 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 2 | 5.1 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 4 | 5.1 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 8 | 5.1 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 39 | 5.1 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 4 | 5.0 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 17 | 5.0 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 25 | 5.0 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 30 | 5.0 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 32 | 5.0 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 19 | 4.9 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 49 | 4.9 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 9 | 4.8 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 34 | 4.8 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 11 | 4.8 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 20 | 4.8 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 21 | 4.8 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 38 | 4.8 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 20 | 4.8 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 2 | 4.7 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 14 | 4.7 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 9 | 4.7 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 31 | 4.7 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 11 | 4.7 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 33 | 4.7 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 6 | 4.6 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 21 | 4.6 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 36 | 4.6 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 49 | 4.6 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 34 | 4.6 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 39 | 4.6 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 44 | 4.6 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 16 | 4.6 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 42 | 4.5 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 25 | 4.5 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 43 | 4.5 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 26 | 4.4 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 22 | 4.3 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 24 | 4.3 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 14 | 4.3 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 43 | 4.3 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 13 | 4.2 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 36 | 4.2 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 47 | 4.2 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 45 | 4.2 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 15 | 4.1 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 23 | 4.1 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 29 | 4.1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 31 | 4.1 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 14 | 4.1 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 19 | 4.1 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 41 | 4.1 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 47 | 4.1 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 33 | 4.0 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 44 | 4.0 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 27 | 4.0 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 19 | 4.0 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 48 | 3.8 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 12 | 3.8 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 12 | 3.8 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 49 | 3.8 |
| (2,50) | 1:A:27:CYS:N | 1:A:27:CYS:CA | 1:A:27:CYS:C | 1:A:28:SER:N | 12 | 3.7 |
| (2,31) | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 1:A:18:VAL:CA | 1:A:18:VAL:C | 37 | 3.7 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 20 | 3.7 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 34 | 3.7 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 8 | 3.6 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 27 | 3.6 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 36 | 3.6 |
| (2,31) | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 1:A:18:VAL:CA | 1:A:18:VAL:C | 40 | 3.5 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 45 | 3.5 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 5 | 3.5 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 44 | 3.5 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 28 | 3.4 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 46 | 3.4 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 46 | 3.4 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 10 | 3.3 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 16 | 3.3 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 21 | 3.2 |
| (2,50) | 1:A:27:CYS:N | 1:A:27:CYS:CA | 1:A:27:CYS:C | 1:A:28:SER:N | 47 | 3.1 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 7 | 3.1 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 18 | 3.1 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 17 | 3.1 |
| (2,28) | 1:A:16:ASN:N | 1:A:16:ASN:CA | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 10 | 3.1 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 6 | 3.1 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 9 | 2.9 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 5 | 2.8 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 40 | 2.8 |
| (2,58) | 1:A:31:GLU:N | 1:A:31:GLU:CA | 1:A:31:GLU:C | 1:A:32:ARG:N | 18 | 2.7 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 1 | 2.7 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 26 | 2.6 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 35 | 2.6 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 37 | 2.6 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 34 | 2.6 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 37 | 2.6 |
| (2,50) | 1:A:27:CYS:N | 1:A:27:CYS:CA | 1:A:27:CYS:C | 1:A:28:SER:N | 18 | 2.5 |
| (2,50) | 1:A:27:CYS:N | 1:A:27:CYS:CA | 1:A:27:CYS:C | 1:A:28:SER:N | 50 | 2.5 |
| (2,31) | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 1:A:18:VAL:CA | 1:A:18:VAL:C | 24 | 2.4 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 30 | 2.4 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 17 | 2.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|--------|--------------|---------------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 44 | 2.4 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 45 | 2.4 |
| (2,29) | 1:A:16:ASN:C | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 50 | 2.3 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 22 | 2.3 |
| (2,58) | 1:A:31:GLU:N | 1:A:31:GLU:CA | 1:A:31:GLU:C | 1:A:32:ARG:N | 35 | 2.2 |
| (2,47) | 1:A:25:GLN:C | 1:A:26:MET:N | 1:A:26:MET:CA | 1:A:26:MET:C | 44 | 2.2 |
| (2,30) | 1:A:17:LYS:N | 1:A:17:LYS:CA | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 3 | 2.2 |
| (2,58) | 1:A:31:GLU:N | 1:A:31:GLU:CA | 1:A:31:GLU:C | 1:A:32:ARG:N | 31 | 2.0 |
| (2,57) | 1:A:30:LEU:C | 1:A:31:GLU:N | 1:A:31:GLU:CA | 1:A:31:GLU:C | 18 | 2.0 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 49 | 2.0 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 24 | 1.9 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 38 | 1.9 |
| (2,50) | 1:A:27:CYS:N | 1:A:27:CYS:CA | 1:A:27:CYS:C | 1:A:28:SER:N | 15 | 1.8 |
| (2,20) | 1:A:12:GLN:N | 1:A:12:GLN:CA | 1:A:12:GLN:C | 1:A:13:CYS:N | 40 | 1.8 |
| (2,19) | 1:A:11:GLU:C | 1:A:12:GLN:N | 1:A:12:GLN:CA | 1:A:12:GLN:C | 14 | 1.8 |
| (2,57) | 1:A:30:LEU:C | 1:A:31:GLU:N | 1:A:31:GLU:CA | 1:A:31:GLU:C | 30 | 1.7 |
| (2,55) | 1:A:29:PRO:C | 1:A:30:LEU:N | 1:A:30:LEU:CA | 1:A:30:LEU:C | 9 | 1.7 |
| (2,34) | 1:A:19:PRO:N | 1:A:19:PRO:CA | 1:A:19:PRO:C | 1:A:20:PHE:N | 29 | 1.7 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 13 | 1.7 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 23 | 1.7 |
| (2,58) | 1:A:31:GLU:N | 1:A:31:GLU:CA | 1:A:31:GLU:C | 1:A:32:ARG:N | 30 | 1.6 |
| (2,47) | 1:A:25:GLN:C | 1:A:26:MET:N | 1:A:26:MET:CA | 1:A:26:MET:C | 19 | 1.6 |
| (2,47) | 1:A:25:GLN:C | 1:A:26:MET:N | 1:A:26:MET:CA | 1:A:26:MET:C | 20 | 1.6 |
| (2,47) | 1:A:25:GLN:C | 1:A:26:MET:N | 1:A:26:MET:CA | 1:A:26:MET:C | 26 | 1.6 |
| (2,47) | 1:A:25:GLN:C | 1:A:26:MET:N | 1:A:26:MET:CA | 1:A:26:MET:C | 45 | 1.6 |
| (2,31) | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 1:A:18:VAL:CA | 1:A:18:VAL:C | 5 | 1.6 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 16 | 1.6 |
| (2,19) | 1:A:11:GLU:C | 1:A:12:GLN:N | 1:A:12:GLN:CA | 1:A:12:GLN:C | 47 | 1.6 |
| (2,58) | 1:A:31:GLU:N | 1:A:31:GLU:CA | 1:A:31:GLU:C | 1:A:32:ARG:N | 15 | 1.5 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 2 | 1.5 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 18 | 1.5 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 31 | 1.5 |
| (2,19) | 1:A:11:GLU:C | 1:A:12:GLN:N | 1:A:12:GLN:CA | 1:A:12:GLN:C | 42 | 1.5 |
| (2,58) | 1:A:31:GLU:N | 1:A:31:GLU:CA | 1:A:31:GLU:C | 1:A:32:ARG:N | 50 | 1.4 |
| (2,34) | 1:A:19:PRO:N | 1:A:19:PRO:CA | 1:A:19:PRO:C | 1:A:20:PHE:N | 4 | 1.4 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 21 | 1.4 |
| (2,55) | 1:A:29:PRO:C | 1:A:30:LEU:N | 1:A:30:LEU:CA | 1:A:30:LEU:C | 12 | 1.3 |
| (2,47) | 1:A:25:GLN:C | 1:A:26:MET:N | 1:A:26:MET:CA | 1:A:26:MET:C | 5 | 1.3 |
| (2,47) | 1:A:25:GLN:C | 1:A:26:MET:N | 1:A:26:MET:CA | 1:A:26:MET:C | 39 | 1.3 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 14 | 1.3 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 20 | 1.3 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 36 | 1.3 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 43 | 1.3 |
| (2,20) | 1:A:12:GLN:N | 1:A:12:GLN:CA | 1:A:12:GLN:C | 1:A:13:CYS:N | 49 | 1.3 |
| (2,19) | 1:A:11:GLU:C | 1:A:12:GLN:N | 1:A:12:GLN:CA | 1:A:12:GLN:C | 41 | 1.3 |
| (2,34) | 1:A:19:PRO:N | 1:A:19:PRO:CA | 1:A:19:PRO:C | 1:A:20:PHE:N | 11 | 1.2 |
| (2,24) | 1:A:14:ASN:N | 1:A:14:ASN:CA | 1:A:14:ASN:C | 1:A:15:VAL:N | 30 | 1.2 |
| (2,20) | 1:A:12:GLN:N | 1:A:12:GLN:CA | 1:A:12:GLN:C | 1:A:13:CYS:N | 14 | 1.2 |
| (2,19) | 1:A:11:GLU:C | 1:A:12:GLN:N | 1:A:12:GLN:CA | 1:A:12:GLN:C | 50 | 1.2 |
| (2,47) | 1:A:25:GLN:C | 1:A:26:MET:N | 1:A:26:MET:CA | 1:A:26:MET:C | 22 | 1.1 |
| (2,47) | 1:A:25:GLN:C | 1:A:26:MET:N | 1:A:26:MET:CA | 1:A:26:MET:C | 33 | 1.1 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Atom-3 | Atom-4 | Model ID | Violation (°) |
|------------|---------------|---------------|---------------|---------------|-----------------|----------------------|
| (2,31) | 1:A:17:LYS:C | 1:A:18:VAL:N | 1:A:18:VAL:CA | 1:A:18:VAL:C | 31 | 1.1 |