



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 28, 2023 – 10:05 AM EDT

PDB ID : 8EPT
BMRB ID : 51655
Title : UBE3A isoform 2 AZUL domain
Authors : Bregnard, T.A.; Bezsonova, I.
Deposited on : 2022-10-06

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

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

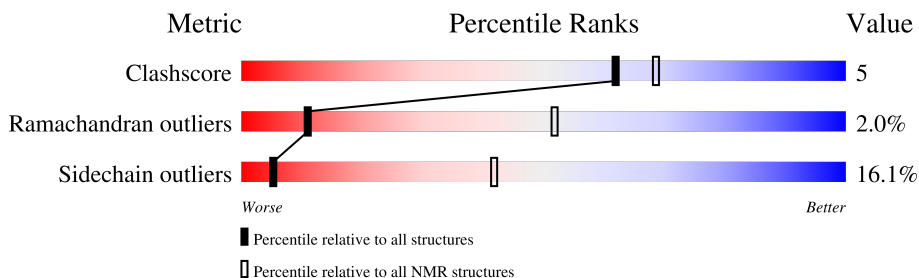
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 89%.

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 | 90 | |

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 19 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

| Well-defined (core) protein residues | | | |
|--------------------------------------|-----------------------|-------------------|--------------|
| Well-defined core | Residue range (total) | Backbone RMSD (Å) | Medoid model |
| 1 | A:31-A:87 (57) | 0.42 | 19 |

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 3 clusters and 2 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 1394 atoms, of which 682 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Ubiquitin-protein ligase E3A.

| Mol | Chain | Residues | Atoms | | | | | | Trace |
|-----|-------|----------|-------|-----|-----|-----|-----|---|-------|
| | | | Total | C | H | N | O | S | |
| 1 | A | 90 | 1393 | 439 | 682 | 128 | 135 | 9 | 0 |

There are 3 discrepancies between the modelled and reference sequences:

| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment | Reference |
|-------|---------|----------|--------|----------------|------------|
| A | 1 | GLY | - | expression tag | UNP Q05086 |
| A | 2 | SER | - | expression tag | UNP Q05086 |
| A | 3 | HIS | - | expression tag | UNP Q05086 |

- Molecule 2 is ZINC ION (three-letter code: ZN) (formula: Zn) (labeled as "Ligand of Interest" by depositor).

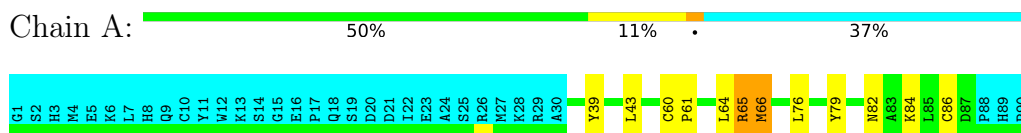
| Mol | Chain | Residues | Atoms | |
|-----|-------|----------|-------|----|
| | | | Total | Zn |
| 2 | A | 1 | 1 | 1 |

4 Residue-property plots [i](#)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A

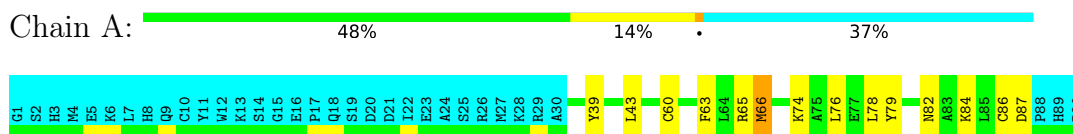


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

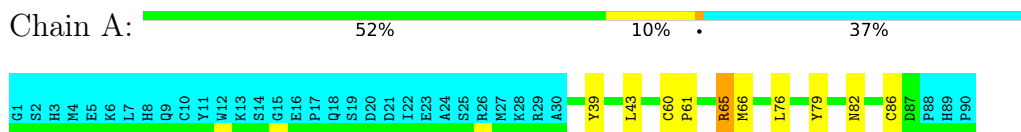
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



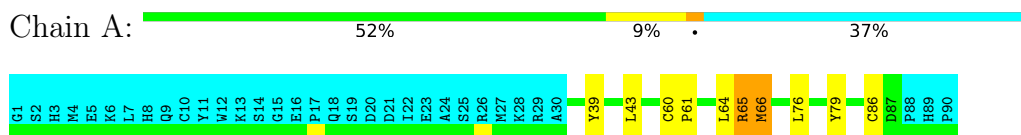
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



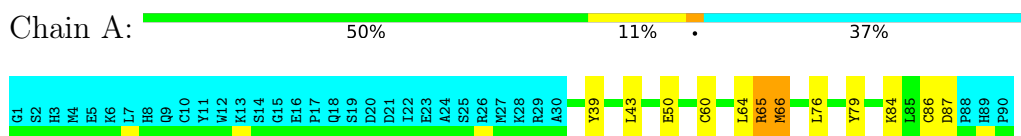
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



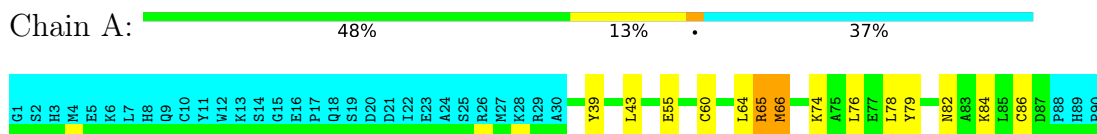
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



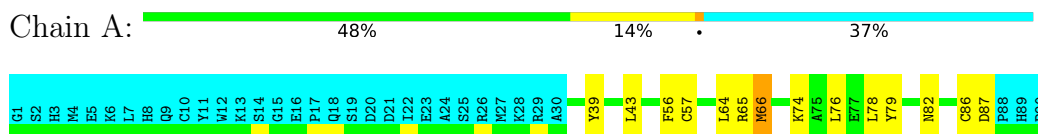
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



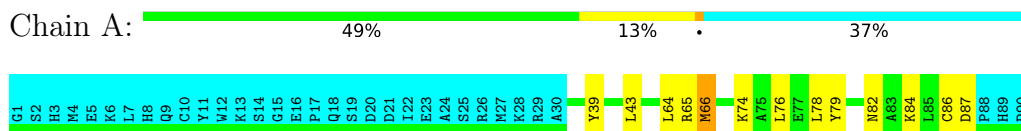
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



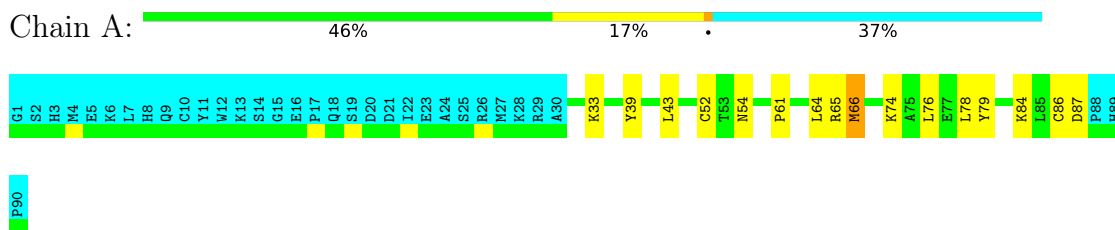
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



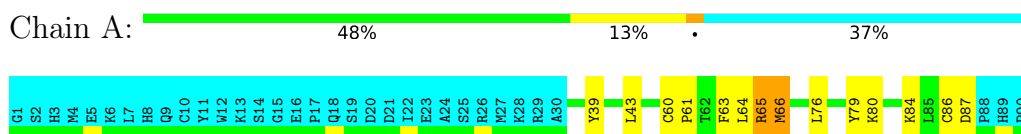
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



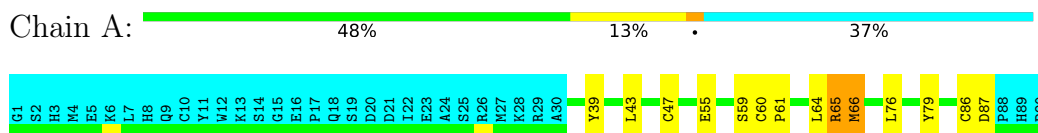
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



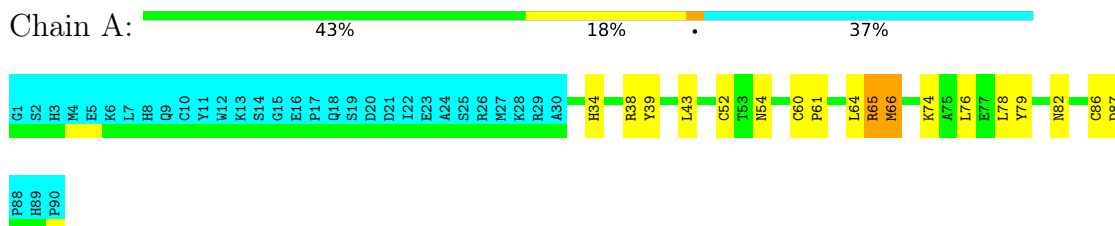
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



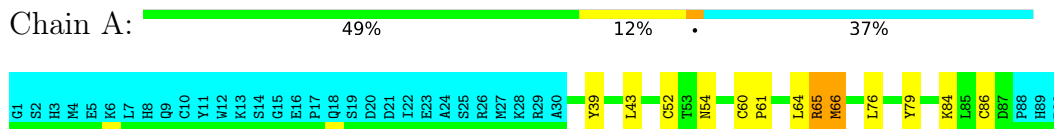
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



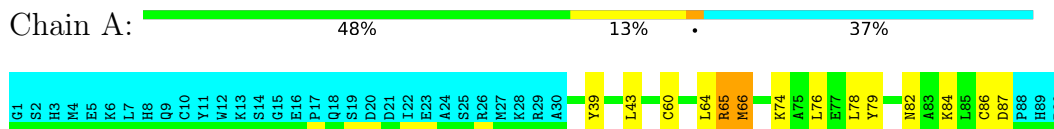
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



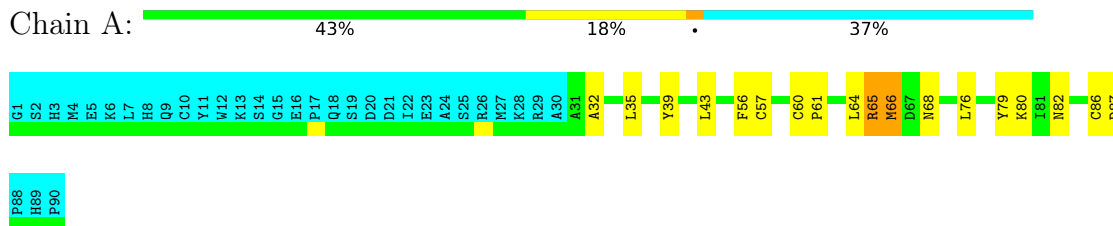
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



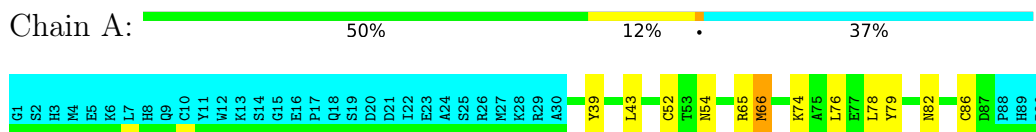
4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



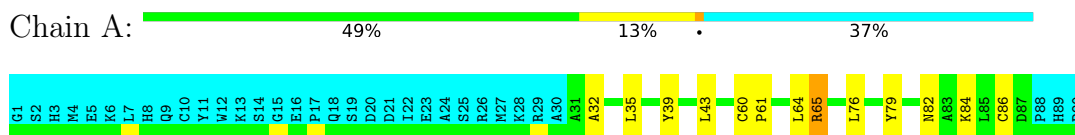
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



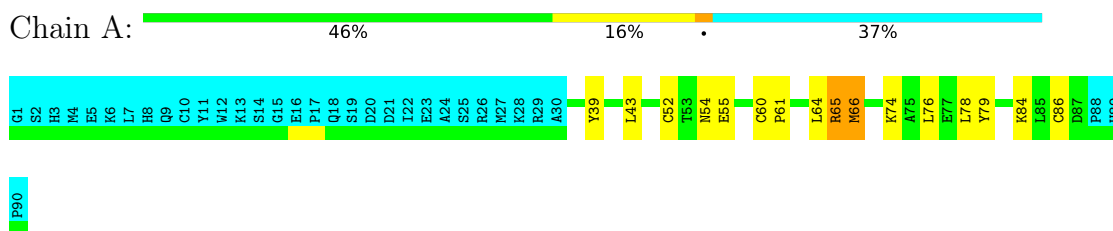
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



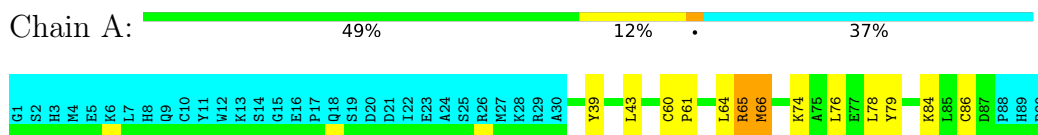
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



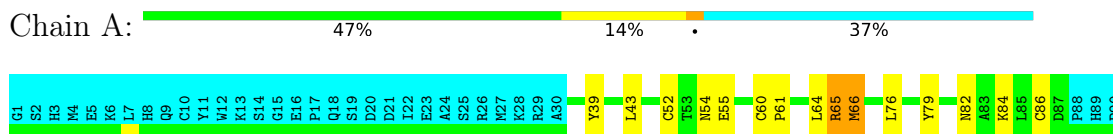
4.2.19 Score per residue for model 19 (medoid)

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: Ubiquitin-protein ligase E3A



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 10000 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

| Software name | Classification | Version |
|---------------|-----------------------|---------|
| CNS | refinement | |
| TALOS | geometry optimization | |
| CYANA | 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 | 1021 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1021 |
| Number of unparsed shifts | 0 |
| Number of shifts with mapping errors | 0 |
| Number of shifts with mapping warnings | 0 |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 89% |

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section:
ZN

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 | 443 | 428 | 426 | 4±1 |
| All | All | 8880 | 8560 | 8520 | 79 |

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 5.

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

| Atom-1 | Atom-2 | Clash(Å) | Distance(Å) | Models | |
|----------------|----------------|----------|-------------|--------|-------|
| | | | | Worst | Total |
| 1:A:60:CYS:SG | 1:A:65:ARG:HB3 | 0.63 | 2.32 | 2 | 12 |
| 1:A:52:CYS:SG | 1:A:54:ASN:HB3 | 0.54 | 2.42 | 8 | 7 |
| 1:A:60:CYS:SG | 1:A:65:ARG:HD2 | 0.53 | 2.42 | 13 | 3 |
| 1:A:60:CYS:HB2 | 1:A:63:PHE:HB2 | 0.52 | 1.82 | 9 | 2 |
| 1:A:39:TYR:O | 1:A:43:LEU:HG | 0.51 | 2.05 | 15 | 20 |
| 1:A:66:MET:N | 1:A:66:MET:SD | 0.51 | 2.83 | 7 | 18 |
| 1:A:32:ALA:HA | 1:A:35:LEU:HB2 | 0.45 | 1.88 | 17 | 2 |
| 1:A:60:CYS:HG | 1:A:65:ARG:HB3 | 0.45 | 1.71 | 12 | 1 |
| 1:A:74:LYS:O | 1:A:78:LEU:HG | 0.43 | 2.13 | 6 | 10 |
| 1:A:56:PHE:O | 1:A:57:CYS:SG | 0.42 | 2.78 | 6 | 2 |
| 1:A:34:HIS:O | 1:A:38:ARG:HG3 | 0.41 | 2.16 | 11 | 1 |
| 1:A:47:CYS:SG | 1:A:59:SER:HB3 | 0.41 | 2.56 | 10 | 1 |

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

| Mol | Chain | Analysed | Favoured | Allowed | Outliers | Percentiles | |
|-----|-------|-----------------|--------------|------------|------------|-------------|----|
| 1 | A | 57/90 (63%) | 51±1 (90±2%) | 5±1 (8±2%) | 1±1 (2±1%) | 11 | 52 |
| All | All | 1140/1800 (63%) | 1024 (90%) | 93 (8%) | 23 (2%) | 11 | 52 |

All 2 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 61 | PRO | 13 |
| 1 | A | 87 | ASP | 10 |

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 | 46/75 (61%) | 39±1 (84±2%) | 7±1 (16±2%) | 5 | 42 |
| All | All | 920/1500 (61%) | 772 (84%) | 148 (16%) | 5 | 42 |

All 13 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 | 65 | ARG | 20 |
| 1 | A | 76 | LEU | 20 |
| 1 | A | 79 | TYR | 20 |
| 1 | A | 86 | CYS | 20 |
| 1 | A | 66 | MET | 19 |
| 1 | A | 64 | LEU | 17 |
| 1 | A | 84 | LYS | 13 |
| 1 | A | 82 | ASN | 10 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1 | A | 55 | GLU | 4 |
| 1 | A | 80 | LYS | 2 |
| 1 | A | 50 | GLU | 1 |
| 1 | A | 33 | LYS | 1 |
| 1 | A | 68 | ASN | 1 |

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

Of 1 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation i

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 89% for the well-defined parts and 86% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *ube3a-isoform2_cshifts*

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 | 1021 |
| Number of shifts mapped to atoms | 1021 |
| 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 |
|------------------------|----------|---------------------------------|-------------------------|
| $^{13}\text{C}_\alpha$ | 88 | -0.46 ± 0.06 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}\text{C}_\beta$ | 85 | 0.12 ± 0.08 | None needed (< 0.5 ppm) |
| $^{13}\text{C}'$ | 83 | -0.22 ± 0.09 | None needed (< 0.5 ppm) |
| ^{15}N | 83 | -0.89 ± 0.33 | Should be applied |

7.1.3 Completeness of resonance assignments i

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 89%, i.e. 670 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 753. 0 out of 6 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ^1H | ^{13}C | ^{15}N |
|-----------|---------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone | 283/285 (99%) | 115/115 (100%) | 112/114 (98%) | 56/56 (100%) |
| Sidechain | 357/405 (88%) | 240/263 (91%) | 111/126 (88%) | 6/16 (38%) |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| | Total | ¹ H | ¹³ C | ¹⁵ N |
|----------|---------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Aromatic | 30/63 (48%) | 15/30 (50%) | 15/29 (52%) | 0/4 (0%) |
| Overall | 670/753 (89%) | 370/408 (91%) | 238/269 (88%) | 62/76 (82%) |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 86%, i.e. 1021 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1194. 0 out of 7 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

| | Total | ¹ H | ¹³ C | ¹⁵ N |
|-----------|-----------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Backbone | 428/446 (96%) | 174/180 (97%) | 171/180 (95%) | 83/86 (97%) |
| Sidechain | 547/640 (85%) | 364/413 (88%) | 175/200 (88%) | 8/27 (30%) |
| Aromatic | 46/108 (43%) | 23/52 (44%) | 22/45 (49%) | 1/11 (9%) |
| Overall | 1021/1194 (86%) | 561/645 (87%) | 368/425 (87%) | 92/124 (74%) |

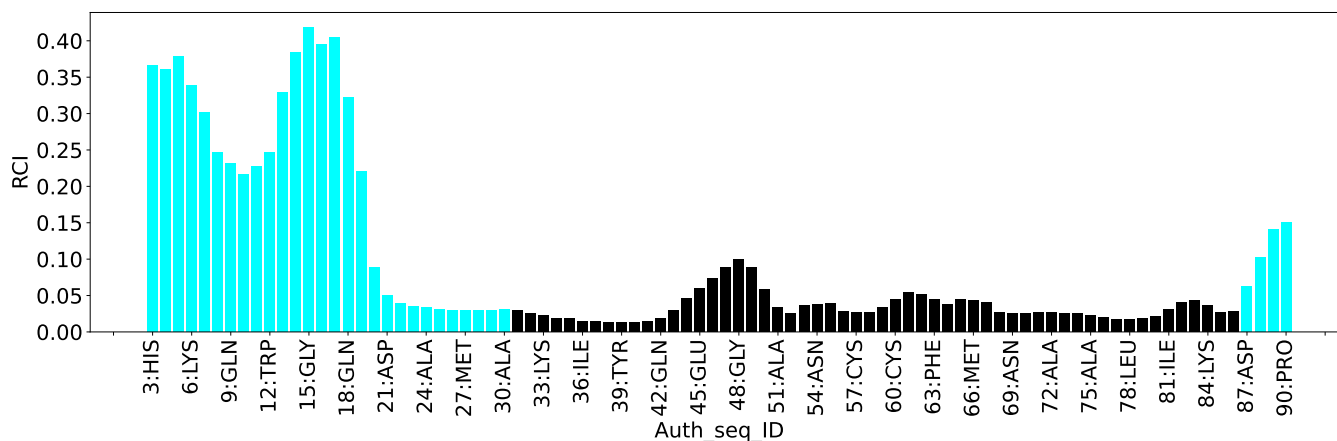
7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

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 | 1732 |
| Intra-residue ($ i-j =0$) | 382 |
| Sequential ($ i-j =1$) | 564 |
| Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$) | 421 |
| Long range ($ i-j \geq 5$) | 356 |
| Inter-chain | 0 |
| Hydrogen bond restraints | 0 |
| Disulfide bond restraints | 9 |
| Total dihedral-angle restraints | 0 |
| Number of unmapped restraints | 6 |
| Number of restraints per residue | 19.2 |
| Number of long range restraints per residue ¹ | 4.1 |

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) | 79.5 | 0.2 |
| 0.2-0.5 (Medium) | 98.6 | 0.5 |
| >0.5 (Large) | 35.6 | 1.98 |

8.2.2 Average number of dihedral-angle violations per model

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

9 Distance violation analysis [i](#)

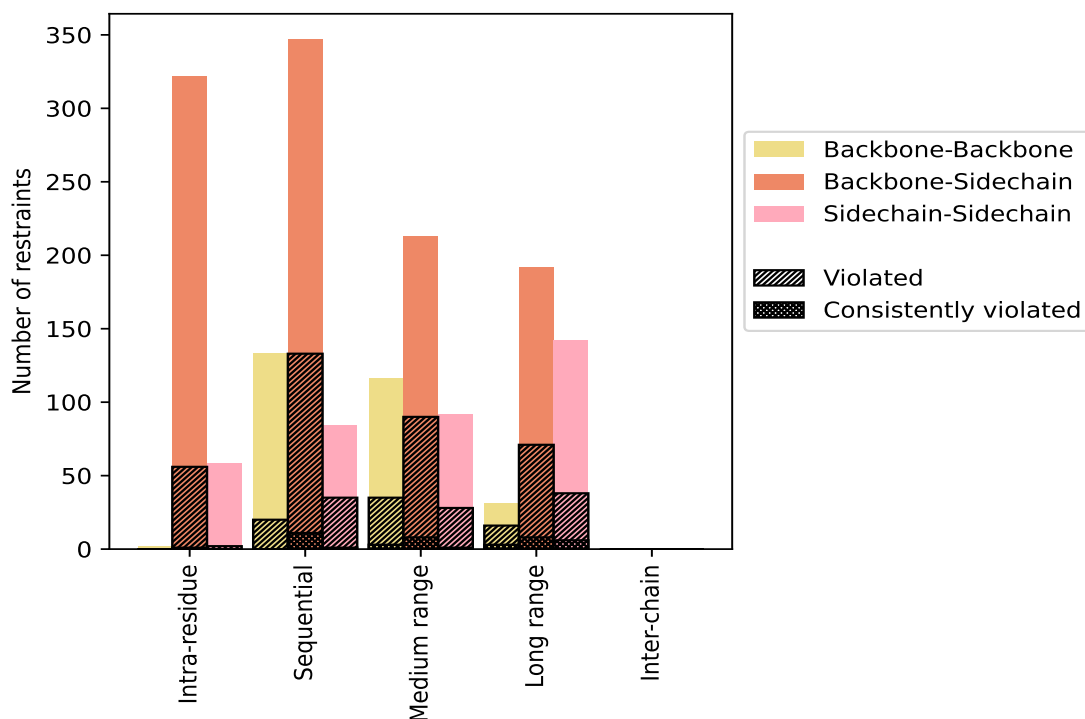
9.1 Summary of distance violations [i](#)

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

| Restrains type | Count | % ¹ | Violated ³ | | | Consistently Violated ⁴ | | |
|---|-------------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
| | | | Count | % ² | % ¹ | Count | % ² | % ¹ |
| Intra-residue ($i-j =0$) | 382 | 22.1 | 58 | 15.2 | 3.3 | 1 | 0.3 | 0.1 |
| Backbone-Backbone | 2 | 0.1 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 322 | 18.6 | 56 | 17.4 | 3.2 | 1 | 0.3 | 0.1 |
| Sidechain-Sidechain | 58 | 3.3 | 2 | 3.4 | 0.1 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Sequential ($i-j =1$) | 564 | 32.6 | 188 | 33.3 | 10.9 | 12 | 2.1 | 0.7 |
| Backbone-Backbone | 133 | 7.7 | 20 | 15.0 | 1.2 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Backbone-Sidechain | 347 | 20.0 | 133 | 38.3 | 7.7 | 11 | 3.2 | 0.6 |
| Sidechain-Sidechain | 84 | 4.8 | 35 | 41.7 | 2.0 | 1 | 1.2 | 0.1 |
| Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$) | 421 | 24.3 | 153 | 36.3 | 8.8 | 12 | 2.9 | 0.7 |
| Backbone-Backbone | 116 | 6.7 | 35 | 30.2 | 2.0 | 3 | 2.6 | 0.2 |
| Backbone-Sidechain | 213 | 12.3 | 90 | 42.3 | 5.2 | 8 | 3.8 | 0.5 |
| Sidechain-Sidechain | 92 | 5.3 | 28 | 30.4 | 1.6 | 1 | 1.1 | 0.1 |
| Long range ($i-j \geq 5$) | 356 | 20.6 | 125 | 35.1 | 7.2 | 17 | 4.8 | 1.0 |
| Backbone-Backbone | 31 | 1.8 | 16 | 51.6 | 0.9 | 3 | 9.7 | 0.2 |
| Backbone-Sidechain | 192 | 11.1 | 71 | 37.0 | 4.1 | 8 | 4.2 | 0.5 |
| Sidechain-Sidechain | 133 | 7.7 | 38 | 28.6 | 2.2 | 6 | 4.5 | 0.3 |
| 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 | 9 | 0.5 | 0 | 0.0 | 0.0 | 0 | 0.0 | 0.0 |
| Total | 1732 | 100.0 | 524 | 30.3 | 30.3 | 42 | 2.4 | 2.4 |
| Backbone-Backbone | 282 | 16.3 | 71 | 25.2 | 4.1 | 6 | 2.1 | 0.3 |
| Backbone-Sidechain | 1074 | 62.0 | 350 | 32.6 | 20.2 | 28 | 2.6 | 1.6 |
| Sidechain-Sidechain | 376 | 21.7 | 103 | 27.4 | 5.9 | 8 | 2.1 | 0.5 |

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 | 10 | 73 | 65 | 65 | 0 | 213 | 0.32 | 1.19 | 0.18 | 0.27 |
| 2 | 14 | 72 | 57 | 66 | 0 | 209 | 0.31 | 0.9 | 0.17 | 0.25 |
| 3 | 17 | 77 | 57 | 61 | 0 | 212 | 0.31 | 0.98 | 0.18 | 0.27 |
| 4 | 18 | 78 | 63 | 60 | 0 | 219 | 0.3 | 0.93 | 0.18 | 0.23 |
| 5 | 21 | 81 | 69 | 59 | 0 | 230 | 0.31 | 0.92 | 0.18 | 0.25 |
| 6 | 12 | 75 | 67 | 60 | 0 | 214 | 0.32 | 1.02 | 0.19 | 0.27 |
| 7 | 18 | 70 | 60 | 48 | 0 | 196 | 0.32 | 1.01 | 0.18 | 0.27 |
| 8 | 16 | 81 | 60 | 64 | 0 | 221 | 0.32 | 0.94 | 0.19 | 0.26 |
| 9 | 11 | 84 | 65 | 57 | 0 | 217 | 0.29 | 1.22 | 0.17 | 0.23 |
| 10 | 11 | 64 | 60 | 53 | 0 | 188 | 0.31 | 1.06 | 0.18 | 0.25 |
| 11 | 13 | 67 | 64 | 62 | 0 | 206 | 0.29 | 0.92 | 0.18 | 0.24 |

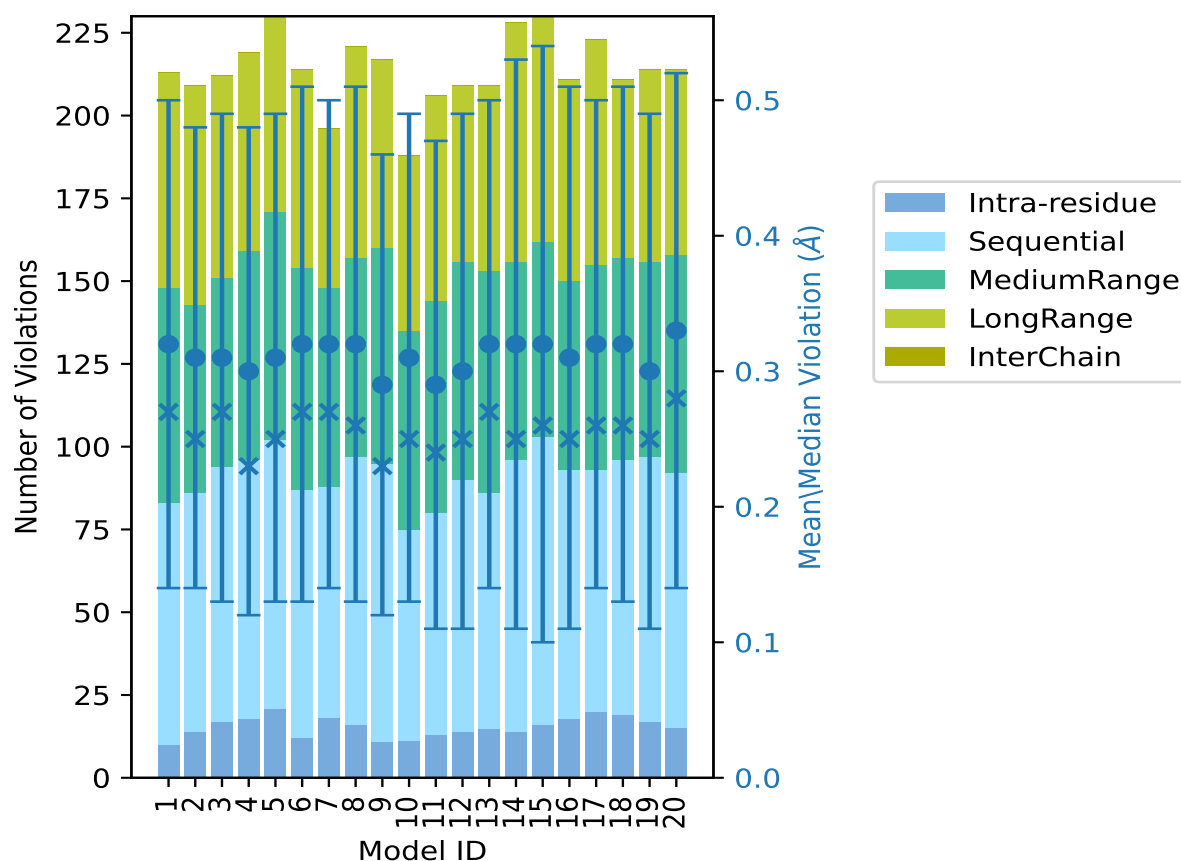
Continued on next page...

Continued from previous page...

| Model ID | Number of violations | | | | | Total | Mean (Å) | Max (Å) | SD ⁶ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
| | IR ¹ | SQ ² | MR ³ | LR ⁴ | IC ⁵ | | | | | |
| 12 | 14 | 76 | 66 | 53 | 0 | 209 | 0.3 | 1.07 | 0.19 | 0.25 |
| 13 | 15 | 71 | 67 | 56 | 0 | 209 | 0.32 | 1.08 | 0.18 | 0.27 |
| 14 | 14 | 82 | 60 | 72 | 0 | 228 | 0.32 | 1.2 | 0.21 | 0.25 |
| 15 | 16 | 87 | 59 | 68 | 0 | 230 | 0.32 | 1.98 | 0.22 | 0.26 |
| 16 | 18 | 75 | 57 | 61 | 0 | 211 | 0.31 | 1.32 | 0.2 | 0.25 |
| 17 | 20 | 73 | 62 | 68 | 0 | 223 | 0.32 | 1.06 | 0.18 | 0.26 |
| 18 | 19 | 77 | 61 | 54 | 0 | 211 | 0.32 | 0.98 | 0.19 | 0.26 |
| 19 | 17 | 80 | 59 | 58 | 0 | 214 | 0.3 | 1.2 | 0.19 | 0.25 |
| 20 | 15 | 77 | 66 | 56 | 0 | 214 | 0.33 | 0.96 | 0.19 | 0.28 |

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

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



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

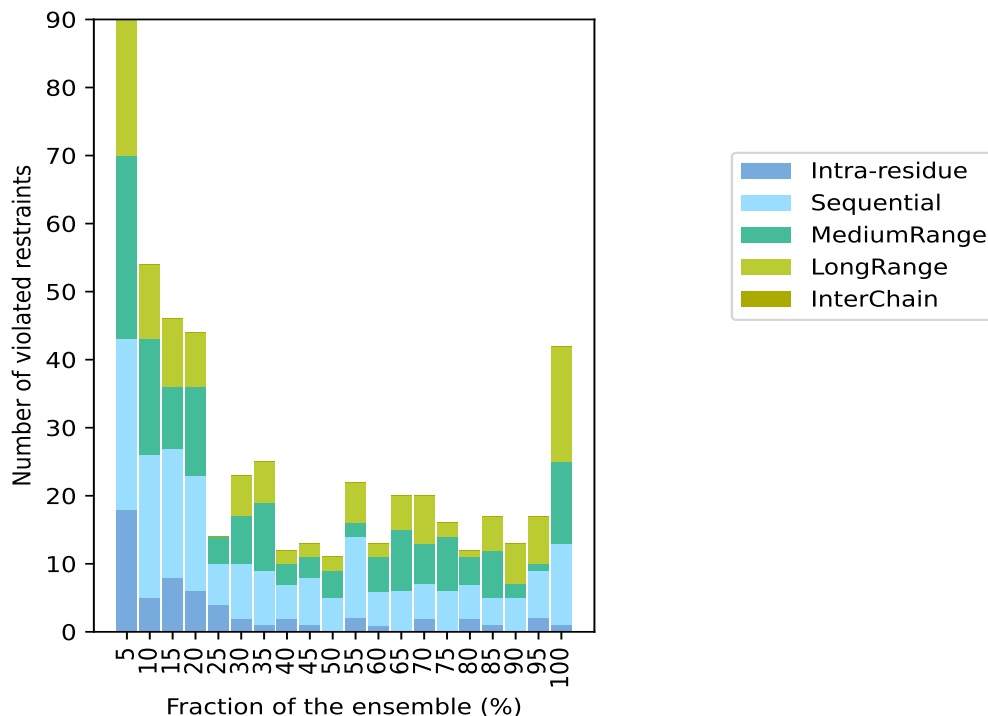
9.3 Distance violation statistics for the ensemble

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 1199(IR:324, SQ:376, MR:268, LR:231, 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 | % |
| 18 | 25 | 27 | 20 | 0 | 90 | 1 | 5.0 |
| 5 | 21 | 17 | 11 | 0 | 54 | 2 | 10.0 |
| 8 | 19 | 9 | 10 | 0 | 46 | 3 | 15.0 |
| 6 | 17 | 13 | 8 | 0 | 44 | 4 | 20.0 |
| 4 | 6 | 4 | 0 | 0 | 14 | 5 | 25.0 |
| 2 | 8 | 7 | 6 | 0 | 23 | 6 | 30.0 |
| 1 | 8 | 10 | 6 | 0 | 25 | 7 | 35.0 |
| 2 | 5 | 3 | 2 | 0 | 12 | 8 | 40.0 |
| 1 | 7 | 3 | 2 | 0 | 13 | 9 | 45.0 |
| 0 | 5 | 4 | 2 | 0 | 11 | 10 | 50.0 |
| 2 | 12 | 2 | 6 | 0 | 22 | 11 | 55.0 |
| 1 | 5 | 5 | 2 | 0 | 13 | 12 | 60.0 |
| 0 | 6 | 9 | 5 | 0 | 20 | 13 | 65.0 |
| 2 | 5 | 6 | 7 | 0 | 20 | 14 | 70.0 |
| 0 | 6 | 8 | 2 | 0 | 16 | 15 | 75.0 |
| 2 | 5 | 4 | 1 | 0 | 12 | 16 | 80.0 |
| 1 | 4 | 7 | 5 | 0 | 17 | 17 | 85.0 |
| 0 | 5 | 2 | 6 | 0 | 13 | 18 | 90.0 |
| 2 | 7 | 1 | 7 | 0 | 17 | 19 | 95.0 |
| 1 | 12 | 12 | 17 | 0 | 42 | 20 | 100.0 |

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

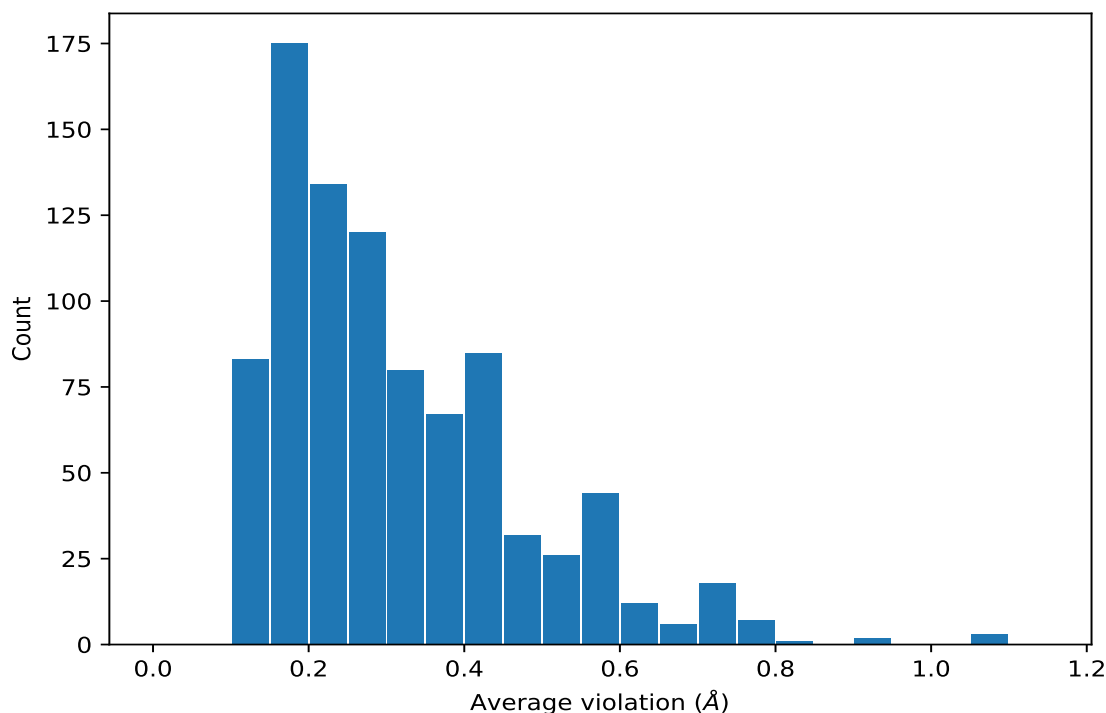
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 20 | 0.74 | 0.09 | 0.77 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 20 | 0.72 | 0.29 | 0.79 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 20 | 0.69 | 0.08 | 0.68 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 20 | 0.67 | 0.04 | 0.67 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 20 | 0.64 | 0.17 | 0.63 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 20 | 0.61 | 0.17 | 0.62 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 20 | 0.56 | 0.03 | 0.56 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 20 | 0.54 | 0.08 | 0.56 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 20 | 0.54 | 0.06 | 0.54 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 20 | 0.54 | 0.03 | 0.53 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 20 | 0.53 | 0.09 | 0.54 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 20 | 0.53 | 0.12 | 0.54 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 20 | 0.53 | 0.04 | 0.54 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 20 | 0.53 | 0.04 | 0.54 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 20 | 0.53 | 0.04 | 0.54 |
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 20 | 0.52 | 0.06 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 20 | 0.51 | 0.04 | 0.51 |
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 20 | 0.51 | 0.1 | 0.53 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 20 | 0.49 | 0.11 | 0.53 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 20 | 0.44 | 0.15 | 0.5 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 20 | 0.44 | 0.13 | 0.46 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 20 | 0.43 | 0.14 | 0.44 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 20 | 0.43 | 0.14 | 0.44 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 20 | 0.43 | 0.14 | 0.44 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 20 | 0.39 | 0.09 | 0.39 |
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 20 | 0.37 | 0.11 | 0.41 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 20 | 0.37 | 0.12 | 0.38 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 20 | 0.37 | 0.12 | 0.38 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 20 | 0.37 | 0.12 | 0.38 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 20 | 0.37 | 0.06 | 0.36 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 20 | 0.36 | 0.15 | 0.32 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 20 | 0.35 | 0.03 | 0.35 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 20 | 0.35 | 0.03 | 0.35 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 20 | 0.35 | 0.03 | 0.35 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 20 | 0.35 | 0.13 | 0.34 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 20 | 0.35 | 0.13 | 0.34 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 20 | 0.35 | 0.13 | 0.34 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 20 | 0.35 | 0.1 | 0.34 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 20 | 0.35 | 0.1 | 0.34 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 20 | 0.35 | 0.1 | 0.34 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 20 | 0.33 | 0.05 | 0.34 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 20 | 0.33 | 0.07 | 0.34 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 20 | 0.33 | 0.07 | 0.34 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 20 | 0.33 | 0.07 | 0.34 |
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 20 | 0.31 | 0.05 | 0.32 |
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 20 | 0.3 | 0.07 | 0.3 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 20 | 0.28 | 0.1 | 0.29 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 20 | 0.28 | 0.1 | 0.29 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 20 | 0.28 | 0.1 | 0.29 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 20 | 0.28 | 0.1 | 0.29 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 20 | 0.28 | 0.1 | 0.29 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 20 | 0.28 | 0.1 | 0.29 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 20 | 0.28 | 0.06 | 0.29 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 20 | 0.27 | 0.05 | 0.28 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 20 | 0.27 | 0.05 | 0.28 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 20 | 0.26 | 0.03 | 0.26 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 20 | 0.26 | 0.06 | 0.27 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 20 | 0.26 | 0.06 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 20 | 0.26 | 0.06 | 0.27 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 20 | 0.25 | 0.08 | 0.3 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 20 | 0.24 | 0.1 | 0.24 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 20 | 0.16 | 0.08 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 20 | 0.16 | 0.08 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 20 | 0.16 | 0.08 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 20 | 0.16 | 0.08 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 20 | 0.16 | 0.08 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 20 | 0.16 | 0.08 | 0.13 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 20 | 0.15 | 0.01 | 0.15 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 19 | 0.48 | 0.13 | 0.52 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 19 | 0.48 | 0.13 | 0.52 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 19 | 0.48 | 0.13 | 0.52 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 19 | 0.46 | 0.1 | 0.5 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 19 | 0.45 | 0.16 | 0.41 |
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 19 | 0.35 | 0.1 | 0.35 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 19 | 0.35 | 0.12 | 0.39 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 19 | 0.35 | 0.12 | 0.39 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 19 | 0.35 | 0.12 | 0.39 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 19 | 0.34 | 0.11 | 0.35 |
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 19 | 0.33 | 0.08 | 0.34 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 19 | 0.28 | 0.05 | 0.28 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 19 | 0.28 | 0.05 | 0.28 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 19 | 0.28 | 0.05 | 0.28 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 19 | 0.28 | 0.06 | 0.29 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 19 | 0.27 | 0.09 | 0.25 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 19 | 0.23 | 0.05 | 0.23 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 19 | 0.23 | 0.05 | 0.23 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 19 | 0.23 | 0.05 | 0.23 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 19 | 0.23 | 0.05 | 0.22 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 19 | 0.21 | 0.04 | 0.21 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 19 | 0.21 | 0.04 | 0.21 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 19 | 0.21 | 0.04 | 0.21 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 19 | 0.18 | 0.03 | 0.19 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 19 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 19 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 19 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD11 | 1:A:74:LYS:HE2 | 18 | 0.55 | 0.13 | 0.57 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD12 | 1:A:74:LYS:HE2 | 18 | 0.55 | 0.13 | 0.57 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD13 | 1:A:74:LYS:HE2 | 18 | 0.55 | 0.13 | 0.57 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HA | 18 | 0.51 | 0.22 | 0.54 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HA | 18 | 0.51 | 0.22 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HA | 18 | 0.51 | 0.22 | 0.54 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 18 | 0.48 | 0.13 | 0.51 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 18 | 0.48 | 0.13 | 0.51 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 18 | 0.48 | 0.13 | 0.51 |
| (1,325) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:H | 18 | 0.48 | 0.24 | 0.5 |
| (1,210) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 18 | 0.41 | 0.07 | 0.43 |
| (1,1015) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:78:LEU:HG | 18 | 0.4 | 0.08 | 0.39 |
| (1,554) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:H | 18 | 0.36 | 0.11 | 0.36 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD3 | 18 | 0.31 | 0.1 | 0.31 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD3 | 18 | 0.31 | 0.1 | 0.31 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD3 | 18 | 0.31 | 0.1 | 0.31 |
| (1,1007) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 18 | 0.24 | 0.07 | 0.24 |
| (1,824) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HB3 | 18 | 0.24 | 0.08 | 0.24 |
| (1,974) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 18 | 0.23 | 0.08 | 0.23 |
| (1,168) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 18 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1100) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:58:ALA:HA | 18 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (1,257) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 17 | 0.81 | 0.18 | 0.88 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:86:CYS:H | 17 | 0.79 | 0.26 | 0.92 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:86:CYS:H | 17 | 0.79 | 0.26 | 0.92 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:86:CYS:H | 17 | 0.79 | 0.26 | 0.92 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB2 | 1:A:62:THR:H | 17 | 0.51 | 0.2 | 0.46 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB3 | 1:A:62:THR:H | 17 | 0.51 | 0.2 | 0.46 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB1 | 17 | 0.42 | 0.14 | 0.44 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB2 | 17 | 0.42 | 0.14 | 0.44 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB3 | 17 | 0.42 | 0.14 | 0.44 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB1 | 17 | 0.42 | 0.14 | 0.44 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB2 | 17 | 0.42 | 0.14 | 0.44 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB3 | 17 | 0.42 | 0.14 | 0.44 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB1 | 17 | 0.42 | 0.14 | 0.44 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB2 | 17 | 0.42 | 0.14 | 0.44 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB3 | 17 | 0.42 | 0.14 | 0.44 |
| (1,214) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:63:PHE:H | 17 | 0.38 | 0.16 | 0.35 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 17 | 0.37 | 0.08 | 0.36 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 17 | 0.37 | 0.08 | 0.36 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 17 | 0.37 | 0.08 | 0.36 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB1 | 17 | 0.32 | 0.06 | 0.32 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB2 | 17 | 0.32 | 0.06 | 0.32 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB3 | 17 | 0.32 | 0.06 | 0.32 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD11 | 17 | 0.29 | 0.1 | 0.32 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD12 | 17 | 0.29 | 0.1 | 0.32 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD13 | 17 | 0.29 | 0.1 | 0.32 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 17 | 0.28 | 0.14 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 17 | 0.28 | 0.14 | 0.19 |
| (1,310) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:75:ALA:H | 17 | 0.26 | 0.07 | 0.25 |
| (1,565) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:51:ALA:H | 17 | 0.25 | 0.1 | 0.26 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD11 | 17 | 0.25 | 0.04 | 0.27 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD12 | 17 | 0.25 | 0.04 | 0.27 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD13 | 17 | 0.25 | 0.04 | 0.27 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:75:ALA:HA | 17 | 0.24 | 0.14 | 0.19 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:75:ALA:HA | 17 | 0.24 | 0.14 | 0.19 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:75:ALA:HA | 17 | 0.24 | 0.14 | 0.19 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG21 | 1:A:63:PHE:H | 17 | 0.22 | 0.06 | 0.24 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG22 | 1:A:63:PHE:H | 17 | 0.22 | 0.06 | 0.24 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG23 | 1:A:63:PHE:H | 17 | 0.22 | 0.06 | 0.24 |
| (1,254) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 17 | 0.21 | 0.02 | 0.22 |
| (1,854) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HB3 | 17 | 0.21 | 0.06 | 0.2 |
| (1,509) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:56:PHE:H | 17 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 16 | 0.58 | 0.22 | 0.55 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 16 | 0.58 | 0.22 | 0.55 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 16 | 0.58 | 0.22 | 0.55 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 16 | 0.58 | 0.22 | 0.55 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 16 | 0.58 | 0.22 | 0.55 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 16 | 0.58 | 0.22 | 0.55 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 16 | 0.58 | 0.22 | 0.55 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 16 | 0.58 | 0.22 | 0.55 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 16 | 0.58 | 0.22 | 0.55 |
| (1,180) | 1:A:88:PRO:HB2 | 1:A:89:HIS:H | 16 | 0.58 | 0.23 | 0.66 |
| (1,827) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HG2 | 16 | 0.45 | 0.18 | 0.45 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 16 | 0.44 | 0.25 | 0.42 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 16 | 0.44 | 0.25 | 0.42 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 16 | 0.44 | 0.25 | 0.42 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 16 | 0.44 | 0.25 | 0.42 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 16 | 0.44 | 0.25 | 0.42 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 16 | 0.44 | 0.25 | 0.42 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 16 | 0.44 | 0.25 | 0.42 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 16 | 0.44 | 0.25 | 0.42 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 16 | 0.44 | 0.25 | 0.42 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 16 | 0.44 | 0.25 | 0.42 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 16 | 0.44 | 0.25 | 0.42 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 16 | 0.44 | 0.25 | 0.42 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 16 | 0.44 | 0.25 | 0.42 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 16 | 0.44 | 0.25 | 0.42 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 16 | 0.44 | 0.25 | 0.42 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 16 | 0.44 | 0.25 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 16 | 0.44 | 0.25 | 0.42 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 16 | 0.44 | 0.25 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 16 | 0.3 | 0.11 | 0.26 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 16 | 0.3 | 0.11 | 0.26 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 16 | 0.3 | 0.11 | 0.26 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HG2 | 16 | 0.26 | 0.11 | 0.24 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 16 | 0.26 | 0.11 | 0.24 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HG2 | 16 | 0.26 | 0.11 | 0.24 |
| (1,958) | 1:A:69:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 16 | 0.23 | 0.07 | 0.22 |
| (1,189) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:H | 16 | 0.23 | 0.11 | 0.21 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.23 | 0.06 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.23 | 0.06 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.23 | 0.06 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 16 | 0.23 | 0.06 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 16 | 0.23 | 0.06 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 16 | 0.23 | 0.06 | 0.22 |
| (1,1017) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:57:CYS:HB2 | 16 | 0.2 | 0.04 | 0.2 |
| (1,806) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:73:ILE:HG12 | 16 | 0.19 | 0.01 | 0.19 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE2 | 16 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE3 | 16 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG2 | 15 | 0.58 | 0.26 | 0.73 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG3 | 15 | 0.58 | 0.26 | 0.73 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG2 | 15 | 0.58 | 0.26 | 0.73 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG3 | 15 | 0.58 | 0.26 | 0.73 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD11 | 15 | 0.41 | 0.14 | 0.39 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 15 | 0.41 | 0.14 | 0.39 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD13 | 15 | 0.41 | 0.14 | 0.39 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD21 | 15 | 0.41 | 0.14 | 0.39 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD22 | 15 | 0.41 | 0.14 | 0.39 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD23 | 15 | 0.41 | 0.14 | 0.39 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HE3 | 15 | 0.4 | 0.17 | 0.4 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HE3 | 15 | 0.4 | 0.17 | 0.4 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HE3 | 15 | 0.4 | 0.17 | 0.4 |
| (1,416) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:HA | 15 | 0.34 | 0.11 | 0.33 |
| (1,947) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HG3 | 15 | 0.31 | 0.13 | 0.31 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:66:MET:H | 15 | 0.28 | 0.08 | 0.28 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:MET:H | 15 | 0.28 | 0.08 | 0.28 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:46:GLY:H | 15 | 0.26 | 0.11 | 0.23 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:46:GLY:H | 15 | 0.26 | 0.11 | 0.23 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:46:GLY:H | 15 | 0.26 | 0.11 | 0.23 |
| (1,203) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:H | 15 | 0.23 | 0.06 | 0.22 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:H | 15 | 0.19 | 0.05 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:H | 15 | 0.19 | 0.05 | 0.2 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:H | 15 | 0.19 | 0.05 | 0.2 |
| (1,1202) | 1:A:76:LEU:HG | 1:A:77:GLU:H | 15 | 0.19 | 0.07 | 0.2 |
| (1,1111) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HA | 15 | 0.18 | 0.06 | 0.15 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB1 | 15 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB2 | 15 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB3 | 15 | 0.18 | 0.03 | 0.18 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB1 | 1:A:78:LEU:HB2 | 15 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB2 | 1:A:78:LEU:HB2 | 15 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB3 | 1:A:78:LEU:HB2 | 15 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (1,625) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HB3 | 15 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1085) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HA | 15 | 0.16 | 0.05 | 0.15 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 15 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 15 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 15 | 0.16 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1236) | 1:A:50:GLU:HA | 1:A:52:CYS:H | 14 | 0.5 | 0.18 | 0.51 |
| (1,152) | 1:A:26:ARG:HG2 | 1:A:27:MET:H | 14 | 0.45 | 0.13 | 0.49 |
| (1,894) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:27:MET:HB3 | 14 | 0.4 | 0.17 | 0.32 |
| (1,447) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:18:GLN:H | 14 | 0.33 | 0.15 | 0.28 |
| (1,1151) | 1:A:11:TYR:HA | 1:A:11:TYR:HE1 | 14 | 0.3 | 0.13 | 0.29 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HD1 | 14 | 0.26 | 0.09 | 0.25 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HD1 | 14 | 0.26 | 0.09 | 0.25 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HD1 | 14 | 0.26 | 0.09 | 0.25 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 14 | 0.25 | 0.09 | 0.24 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 14 | 0.25 | 0.09 | 0.24 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 14 | 0.25 | 0.09 | 0.24 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:HA | 14 | 0.23 | 0.09 | 0.2 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:HA | 14 | 0.23 | 0.09 | 0.2 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:HA | 14 | 0.23 | 0.09 | 0.2 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB2 | 14 | 0.23 | 0.05 | 0.24 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB3 | 14 | 0.23 | 0.05 | 0.24 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 14 | 0.21 | 0.12 | 0.17 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 14 | 0.21 | 0.12 | 0.17 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 14 | 0.21 | 0.12 | 0.17 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB1 | 14 | 0.2 | 0.06 | 0.19 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB2 | 14 | 0.2 | 0.06 | 0.19 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB3 | 14 | 0.2 | 0.06 | 0.19 |
| (1,41) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:78:LEU:HG | 14 | 0.2 | 0.08 | 0.18 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB1 | 1:A:59:SER:HA | 14 | 0.2 | 0.05 | 0.2 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB2 | 1:A:59:SER:HA | 14 | 0.2 | 0.05 | 0.2 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB3 | 1:A:59:SER:HA | 14 | 0.2 | 0.05 | 0.2 |
| (1,690) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HA | 14 | 0.2 | 0.05 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,513) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:H | 14 | 0.19 | 0.04 | 0.2 |
| (1,424) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:13:LYS:HA | 14 | 0.19 | 0.05 | 0.19 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG21 | 14 | 0.18 | 0.1 | 0.15 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG22 | 14 | 0.18 | 0.1 | 0.15 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG23 | 14 | 0.18 | 0.1 | 0.15 |
| (1,1186) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HA | 14 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,900) | 1:A:87:ASP:HA | 1:A:88:PRO:HB3 | 14 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1047) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HA | 14 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB2 | 13 | 0.37 | 0.12 | 0.36 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB3 | 13 | 0.37 | 0.12 | 0.36 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD11 | 13 | 0.32 | 0.18 | 0.23 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD12 | 13 | 0.32 | 0.18 | 0.23 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD13 | 13 | 0.32 | 0.18 | 0.23 |
| (1,1163) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:79:TYR:HE2 | 13 | 0.29 | 0.15 | 0.26 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG2 | 1:A:89:HIS:H | 13 | 0.28 | 0.06 | 0.29 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG3 | 1:A:89:HIS:H | 13 | 0.28 | 0.06 | 0.29 |
| (1,1081) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HA | 13 | 0.27 | 0.08 | 0.25 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:25:SER:H | 13 | 0.25 | 0.09 | 0.27 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:25:SER:H | 13 | 0.25 | 0.09 | 0.27 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:25:SER:H | 13 | 0.25 | 0.09 | 0.27 |
| (1,865) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HB2 | 13 | 0.25 | 0.1 | 0.25 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD2 | 13 | 0.25 | 0.09 | 0.21 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD3 | 13 | 0.25 | 0.09 | 0.21 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD2 | 13 | 0.25 | 0.09 | 0.21 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD3 | 13 | 0.25 | 0.09 | 0.21 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:H | 13 | 0.24 | 0.1 | 0.19 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:H | 13 | 0.24 | 0.1 | 0.19 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:H | 13 | 0.24 | 0.1 | 0.19 |
| (1,398) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:24:ALA:H | 13 | 0.23 | 0.1 | 0.2 |
| (1,454) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:H | 13 | 0.22 | 0.09 | 0.18 |
| (1,1008) | 1:A:34:HIS:HB3 | 1:A:35:LEU:HA | 13 | 0.21 | 0.08 | 0.18 |
| (1,405) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:65:ARG:HA | 13 | 0.19 | 0.08 | 0.16 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB1 | 13 | 0.18 | 0.04 | 0.19 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB2 | 13 | 0.18 | 0.04 | 0.19 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB3 | 13 | 0.18 | 0.04 | 0.19 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:24:ALA:H | 13 | 0.17 | 0.06 | 0.17 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:24:ALA:H | 13 | 0.17 | 0.06 | 0.17 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:24:ALA:H | 13 | 0.17 | 0.06 | 0.17 |
| (1,212) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:67:ASP:H | 13 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB2 | 13 | 0.15 | 0.03 | 0.16 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB3 | 13 | 0.15 | 0.03 | 0.16 |
| (1,791) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 13 | 0.15 | 0.04 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1281) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:43:LEU:H | 13 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (1,986) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:HA | 13 | 0.14 | 0.03 | 0.13 |
| (1,239) | 1:A:61:PRO:HG2 | 1:A:63:PHE:H | 12 | 0.56 | 0.25 | 0.6 |
| (1,903) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:61:PRO:HB3 | 12 | 0.53 | 0.15 | 0.54 |
| (1,941) | 1:A:23:GLU:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 12 | 0.47 | 0.18 | 0.52 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD11 | 12 | 0.41 | 0.22 | 0.34 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD12 | 12 | 0.41 | 0.22 | 0.34 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD13 | 12 | 0.41 | 0.22 | 0.34 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD11 | 12 | 0.41 | 0.22 | 0.34 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD12 | 12 | 0.41 | 0.22 | 0.34 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD13 | 12 | 0.41 | 0.22 | 0.34 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD11 | 12 | 0.41 | 0.22 | 0.34 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD12 | 12 | 0.41 | 0.22 | 0.34 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD13 | 12 | 0.41 | 0.22 | 0.34 |
| (1,1340) | 1:A:84:LYS:HG3 | 1:A:85:LEU:H | 12 | 0.25 | 0.1 | 0.22 |
| (1,1171) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:H | 12 | 0.24 | 0.05 | 0.24 |
| (1,1055) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:66:MET:HG3 | 12 | 0.24 | 0.09 | 0.22 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG21 | 12 | 0.23 | 0.33 | 0.12 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG22 | 12 | 0.23 | 0.33 | 0.12 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG23 | 12 | 0.23 | 0.33 | 0.12 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 12 | 0.23 | 0.06 | 0.24 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 12 | 0.23 | 0.06 | 0.24 |
| (1,840) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:HA | 12 | 0.22 | 0.07 | 0.22 |
| (1,1040) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HD3 | 12 | 0.19 | 0.05 | 0.2 |
| (1,243) | 1:A:37:GLU:HB2 | 1:A:39:TYR:H | 12 | 0.17 | 0.05 | 0.18 |
| (1,324) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:H | 12 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD21 | 11 | 0.56 | 0.12 | 0.59 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD22 | 11 | 0.56 | 0.12 | 0.59 |
| (1,1109) | 1:A:26:ARG:HG3 | 1:A:27:MET:HA | 11 | 0.55 | 0.1 | 0.59 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:27:MET:H | 11 | 0.43 | 0.18 | 0.46 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:27:MET:H | 11 | 0.43 | 0.18 | 0.46 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HA | 11 | 0.37 | 0.13 | 0.36 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HA | 11 | 0.37 | 0.13 | 0.36 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HA | 11 | 0.37 | 0.13 | 0.36 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG21 | 11 | 0.33 | 0.52 | 0.15 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG22 | 11 | 0.33 | 0.52 | 0.15 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG23 | 11 | 0.33 | 0.52 | 0.15 |
| (1,978) | 1:A:86:CYS:HB2 | 1:A:87:ASP:HA | 11 | 0.33 | 0.14 | 0.33 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG21 | 11 | 0.29 | 0.1 | 0.31 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG22 | 11 | 0.29 | 0.1 | 0.31 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG23 | 11 | 0.29 | 0.1 | 0.31 |
| (1,913) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HD3 | 11 | 0.29 | 0.06 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 11 | 0.27 | 0.14 | 0.29 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 11 | 0.27 | 0.14 | 0.29 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 11 | 0.27 | 0.14 | 0.29 |
| (1,328) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:49:ASN:HB2 | 11 | 0.25 | 0.13 | 0.2 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG2 | 11 | 0.25 | 0.08 | 0.21 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG3 | 11 | 0.25 | 0.08 | 0.21 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG2 | 11 | 0.25 | 0.08 | 0.21 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG3 | 11 | 0.25 | 0.08 | 0.21 |
| (1,183) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HB2 | 11 | 0.24 | 0.08 | 0.23 |
| (1,276) | 1:A:66:MET:HG3 | 1:A:71:ALA:H | 11 | 0.24 | 0.07 | 0.26 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB1 | 11 | 0.21 | 0.09 | 0.17 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB2 | 11 | 0.21 | 0.09 | 0.17 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB3 | 11 | 0.21 | 0.09 | 0.17 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD11 | 11 | 0.21 | 0.07 | 0.2 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD12 | 11 | 0.21 | 0.07 | 0.2 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD13 | 11 | 0.21 | 0.07 | 0.2 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 11 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 11 | 0.2 | 0.02 | 0.21 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:72:ALA:H | 11 | 0.2 | 0.08 | 0.21 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:72:ALA:H | 11 | 0.2 | 0.08 | 0.21 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:72:ALA:H | 11 | 0.2 | 0.08 | 0.21 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 11 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 11 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 11 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,655) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 11 | 0.18 | 0.08 | 0.15 |
| (1,925) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:55:GLU:HA | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1262) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HA | 11 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:71:ALA:HA | 11 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 11 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:71:ALA:HA | 11 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD11 | 10 | 0.5 | 0.22 | 0.42 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD12 | 10 | 0.5 | 0.22 | 0.42 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD13 | 10 | 0.5 | 0.22 | 0.42 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 10 | 0.41 | 0.2 | 0.36 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 10 | 0.41 | 0.2 | 0.36 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 10 | 0.41 | 0.2 | 0.36 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 10 | 0.41 | 0.2 | 0.36 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 10 | 0.41 | 0.2 | 0.36 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 10 | 0.41 | 0.2 | 0.36 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 10 | 0.41 | 0.2 | 0.36 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 10 | 0.41 | 0.2 | 0.36 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 10 | 0.41 | 0.2 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,545) | 1:A:16:GLU:H | 1:A:18:GLN:H | 10 | 0.39 | 0.14 | 0.42 |
| (1,217) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:H | 10 | 0.34 | 0.13 | 0.32 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:71:ALA:HA | 10 | 0.24 | 0.13 | 0.23 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:71:ALA:HA | 10 | 0.24 | 0.13 | 0.23 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:71:ALA:HA | 10 | 0.24 | 0.13 | 0.23 |
| (1,1088) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG2 | 10 | 0.23 | 0.06 | 0.22 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 10 | 0.22 | 0.06 | 0.24 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 10 | 0.22 | 0.06 | 0.24 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 10 | 0.22 | 0.06 | 0.24 |
| (1,884) | 1:A:77:GLU:HG2 | 1:A:78:LEU:HA | 10 | 0.2 | 0.08 | 0.18 |
| (1,93) | 1:A:85:LEU:HG | 1:A:86:CYS:H | 10 | 0.2 | 0.07 | 0.18 |
| (1,399) | 1:A:26:ARG:HA | 1:A:28:LYS:H | 10 | 0.19 | 0.08 | 0.16 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG2 | 10 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG3 | 10 | 0.15 | 0.02 | 0.16 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB1 | 9 | 0.44 | 0.23 | 0.43 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB2 | 9 | 0.44 | 0.23 | 0.43 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB3 | 9 | 0.44 | 0.23 | 0.43 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB1 | 9 | 0.44 | 0.23 | 0.43 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB2 | 9 | 0.44 | 0.23 | 0.43 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB3 | 9 | 0.44 | 0.23 | 0.43 |
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG2 | 1:A:7:LEU:H | 9 | 0.38 | 0.15 | 0.36 |
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG3 | 1:A:7:LEU:H | 9 | 0.38 | 0.15 | 0.36 |
| (1,225) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:H | 9 | 0.37 | 0.09 | 0.4 |
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE2 | 1:A:81:ILE:H | 9 | 0.33 | 0.18 | 0.27 |
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE3 | 1:A:81:ILE:H | 9 | 0.33 | 0.18 | 0.27 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB1 | 9 | 0.28 | 0.1 | 0.31 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB2 | 9 | 0.28 | 0.1 | 0.31 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB3 | 9 | 0.28 | 0.1 | 0.31 |
| (1,536) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:60:CYS:H | 9 | 0.28 | 0.12 | 0.22 |
| (1,1124) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:22:ILE:HB | 9 | 0.23 | 0.11 | 0.19 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE2 | 1:A:85:LEU:H | 9 | 0.22 | 0.06 | 0.2 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE3 | 1:A:85:LEU:H | 9 | 0.22 | 0.06 | 0.2 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 9 | 0.2 | 0.07 | 0.2 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 9 | 0.2 | 0.07 | 0.2 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 9 | 0.2 | 0.07 | 0.2 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG21 | 9 | 0.18 | 0.07 | 0.15 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG22 | 9 | 0.18 | 0.07 | 0.15 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG23 | 9 | 0.18 | 0.07 | 0.15 |
| (1,319) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:86:CYS:HB2 | 9 | 0.18 | 0.04 | 0.17 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE2 | 9 | 0.15 | 0.04 | 0.15 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE3 | 9 | 0.15 | 0.04 | 0.15 |
| (1,506) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:CYS:H | 9 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE1 | 1:A:7:LEU:HG | 8 | 0.55 | 0.35 | 0.38 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE2 | 1:A:7:LEU:HG | 8 | 0.55 | 0.35 | 0.38 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE3 | 1:A:7:LEU:HG | 8 | 0.55 | 0.35 | 0.38 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HA | 8 | 0.38 | 0.12 | 0.36 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HA | 8 | 0.38 | 0.12 | 0.36 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HA | 8 | 0.38 | 0.12 | 0.36 |
| (1,826) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HA | 8 | 0.33 | 0.17 | 0.28 |
| (1,367) | 1:A:41:HIS:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 8 | 0.28 | 0.12 | 0.26 |
| (1,1440) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:HA | 8 | 0.26 | 0.05 | 0.26 |
| (1,1440) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:HA | 8 | 0.26 | 0.05 | 0.26 |
| (1,910) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG3 | 8 | 0.21 | 0.03 | 0.2 |
| (1,1080) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:74:LYS:HE3 | 8 | 0.18 | 0.05 | 0.16 |
| (1,1521) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:34:HIS:HA | 8 | 0.18 | 0.05 | 0.16 |
| (1,1521) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:34:HIS:HA | 8 | 0.18 | 0.05 | 0.16 |
| (1,897) | 1:A:27:MET:HB2 | 1:A:28:LYS:HA | 8 | 0.18 | 0.07 | 0.15 |
| (1,300) | 1:A:63:PHE:H | 1:A:63:PHE:HB3 | 8 | 0.16 | 0.02 | 0.15 |
| (1,400) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:75:ALA:H | 8 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,226) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:77:GLU:HB3 | 8 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1458) | 1:A:20:ASP:HB2 | 1:A:23:GLU:HB3 | 7 | 0.47 | 0.23 | 0.62 |
| (1,1458) | 1:A:20:ASP:HB3 | 1:A:23:GLU:HB3 | 7 | 0.47 | 0.23 | 0.62 |
| (1,857) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:23:GLU:HB3 | 7 | 0.47 | 0.17 | 0.47 |
| (1,1645) | 1:A:67:ASP:HB2 | 1:A:68:ASN:HA | 7 | 0.44 | 0.16 | 0.55 |
| (1,1645) | 1:A:67:ASP:HB3 | 1:A:68:ASN:HA | 7 | 0.44 | 0.16 | 0.55 |
| (1,1250) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:68:ASN:HD21 | 7 | 0.42 | 0.16 | 0.46 |
| (1,417) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HA | 7 | 0.34 | 0.08 | 0.33 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD11 | 7 | 0.32 | 0.14 | 0.37 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD12 | 7 | 0.32 | 0.14 | 0.37 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD13 | 7 | 0.32 | 0.14 | 0.37 |
| (1,1004) | 1:A:40:TYR:HB3 | 1:A:72:ALA:HA | 7 | 0.3 | 0.05 | 0.3 |
| (1,1401) | 1:A:10:CYS:HB2 | 1:A:11:TYR:H | 7 | 0.3 | 0.1 | 0.3 |
| (1,1401) | 1:A:10:CYS:HB3 | 1:A:11:TYR:H | 7 | 0.3 | 0.1 | 0.3 |
| (1,1011) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 7 | 0.29 | 0.14 | 0.19 |
| (1,1418) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:14:SER:H | 7 | 0.27 | 0.09 | 0.28 |
| (1,1418) | 1:A:13:LYS:HG3 | 1:A:14:SER:H | 7 | 0.27 | 0.09 | 0.28 |
| (1,835) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:82:ASN:HA | 7 | 0.27 | 0.14 | 0.23 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB1 | 7 | 0.24 | 0.12 | 0.2 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB2 | 7 | 0.24 | 0.12 | 0.2 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB3 | 7 | 0.24 | 0.12 | 0.2 |
| (1,1682) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 7 | 0.23 | 0.12 | 0.19 |
| (1,1682) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 7 | 0.23 | 0.12 | 0.19 |
| (1,504) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:12:TRP:HZ2 | 7 | 0.23 | 0.13 | 0.17 |
| (1,870) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 7 | 0.22 | 0.1 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,463) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:79:TYR:H | 7 | 0.22 | 0.11 | 0.17 |
| (1,1709) | 1:A:86:CYS:HA | 1:A:87:ASP:HB2 | 7 | 0.19 | 0.05 | 0.2 |
| (1,1709) | 1:A:86:CYS:HA | 1:A:87:ASP:HB3 | 7 | 0.19 | 0.05 | 0.2 |
| (1,724) | 1:A:85:LEU:HG | 1:A:86:CYS:HA | 7 | 0.19 | 0.06 | 0.2 |
| (1,1220) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:81:ILE:H | 7 | 0.17 | 0.04 | 0.17 |
| (1,287) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:H | 7 | 0.17 | 0.03 | 0.16 |
| (1,717) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HG13 | 7 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD11 | 1:A:80:LYS:H | 7 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD12 | 1:A:80:LYS:H | 7 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD13 | 1:A:80:LYS:H | 7 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD21 | 1:A:80:LYS:H | 7 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD22 | 1:A:80:LYS:H | 7 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD23 | 1:A:80:LYS:H | 7 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 7 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG21 | 7 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG22 | 7 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG23 | 7 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,1227) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:ASN:HA | 7 | 0.13 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD11 | 1:A:38:ARG:HD2 | 6 | 0.74 | 0.42 | 0.84 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD11 | 1:A:38:ARG:HD3 | 6 | 0.74 | 0.42 | 0.84 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:38:ARG:HD2 | 6 | 0.74 | 0.42 | 0.84 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:38:ARG:HD3 | 6 | 0.74 | 0.42 | 0.84 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:38:ARG:HD2 | 6 | 0.74 | 0.42 | 0.84 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:38:ARG:HD3 | 6 | 0.74 | 0.42 | 0.84 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD21 | 1:A:38:ARG:HD2 | 6 | 0.74 | 0.42 | 0.84 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD21 | 1:A:38:ARG:HD3 | 6 | 0.74 | 0.42 | 0.84 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:38:ARG:HD2 | 6 | 0.74 | 0.42 | 0.84 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:38:ARG:HD3 | 6 | 0.74 | 0.42 | 0.84 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:38:ARG:HD2 | 6 | 0.74 | 0.42 | 0.84 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:38:ARG:HD3 | 6 | 0.74 | 0.42 | 0.84 |
| (1,1572) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 6 | 0.61 | 0.12 | 0.67 |
| (1,1572) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 6 | 0.61 | 0.12 | 0.67 |
| (1,1492) | 1:A:26:ARG:HD2 | 1:A:27:MET:HA | 6 | 0.56 | 0.17 | 0.61 |
| (1,1492) | 1:A:26:ARG:HD3 | 1:A:27:MET:HA | 6 | 0.56 | 0.17 | 0.61 |
| (1,174) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:26:ARG:HG3 | 6 | 0.55 | 0.09 | 0.6 |
| (1,1714) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:HB2 | 6 | 0.52 | 0.17 | 0.58 |
| (1,1714) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:HB3 | 6 | 0.52 | 0.17 | 0.58 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG21 | 6 | 0.48 | 0.04 | 0.47 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG22 | 6 | 0.48 | 0.04 | 0.47 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG23 | 6 | 0.48 | 0.04 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,475) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:69:ASN:HD22 | 6 | 0.47 | 0.07 | 0.46 |
| (1,1123) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:24:ALA:HA | 6 | 0.45 | 0.12 | 0.4 |
| (1,526) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:69:ASN:HD21 | 6 | 0.41 | 0.07 | 0.43 |
| (1,420) | 1:A:48:GLY:HA3 | 1:A:89:HIS:H | 6 | 0.38 | 0.21 | 0.41 |
| (1,1414) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:14:SER:HB2 | 6 | 0.32 | 0.14 | 0.33 |
| (1,1414) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:14:SER:HB3 | 6 | 0.32 | 0.14 | 0.33 |
| (1,1326) | 1:A:65:ARG:HG3 | 1:A:66:MET:H | 6 | 0.23 | 0.1 | 0.24 |
| (1,1012) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:79:TYR:HA | 6 | 0.22 | 0.08 | 0.21 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG21 | 6 | 0.2 | 0.06 | 0.19 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG22 | 6 | 0.2 | 0.06 | 0.19 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG23 | 6 | 0.2 | 0.06 | 0.19 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:83:ALA:H | 6 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:83:ALA:H | 6 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:83:ALA:H | 6 | 0.2 | 0.03 | 0.21 |
| (1,461) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:83:ALA:H | 6 | 0.18 | 0.05 | 0.16 |
| (1,1338) | 1:A:89:HIS:H | 1:A:90:PRO:HA | 6 | 0.18 | 0.05 | 0.16 |
| (1,251) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:60:CYS:H | 6 | 0.17 | 0.03 | 0.17 |
| (1,396) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:45:GLU:H | 6 | 0.16 | 0.06 | 0.14 |
| (1,160) | 1:A:79:TYR:H | 1:A:80:LYS:HG3 | 6 | 0.16 | 0.04 | 0.15 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB1 | 6 | 0.15 | 0.05 | 0.14 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB2 | 6 | 0.15 | 0.05 | 0.14 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB3 | 6 | 0.15 | 0.05 | 0.14 |
| (1,462) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:82:ASN:H | 6 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,440) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HA | 6 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1231) | 1:A:55:GLU:HG3 | 1:A:56:PHE:HD1 | 5 | 0.64 | 0.21 | 0.74 |
| (1,1445) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HG12 | 5 | 0.6 | 0.24 | 0.67 |
| (1,1445) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HG13 | 5 | 0.6 | 0.24 | 0.67 |
| (1,444) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:H | 5 | 0.41 | 0.11 | 0.48 |
| (1,1430) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:16:GLU:HG2 | 5 | 0.33 | 0.08 | 0.37 |
| (1,1430) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:16:GLU:HG3 | 5 | 0.33 | 0.08 | 0.37 |
| (1,178) | 1:A:23:GLU:H | 1:A:26:ARG:HG3 | 5 | 0.31 | 0.13 | 0.29 |
| (1,1700) | 1:A:84:LYS:HD2 | 1:A:85:LEU:H | 5 | 0.29 | 0.15 | 0.26 |
| (1,1700) | 1:A:84:LYS:HD3 | 1:A:85:LEU:H | 5 | 0.29 | 0.15 | 0.26 |
| (1,1644) | 1:A:67:ASP:HB2 | 1:A:68:ASN:H | 5 | 0.26 | 0.04 | 0.26 |
| (1,1644) | 1:A:67:ASP:HB3 | 1:A:68:ASN:H | 5 | 0.26 | 0.04 | 0.26 |
| (1,426) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:60:CYS:H | 5 | 0.23 | 0.11 | 0.15 |
| (1,1439) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:H | 5 | 0.2 | 0.06 | 0.18 |
| (1,1439) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:H | 5 | 0.2 | 0.06 | 0.18 |
| (1,544) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:16:GLU:H | 5 | 0.19 | 0.06 | 0.18 |
| (1,260) | 1:A:61:PRO:HB2 | 1:A:63:PHE:H | 5 | 0.19 | 0.05 | 0.2 |
| (1,307) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:47:CYS:HB2 | 5 | 0.15 | 0.03 | 0.17 |
| (1,1173) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:40:TYR:HE1 | 5 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1592) | 1:A:45:GLU:HA | 1:A:45:GLU:HG2 | 5 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1592) | 1:A:45:GLU:HA | 1:A:45:GLU:HG3 | 5 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,662) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HD11 | 4 | 1.08 | 0.02 | 1.08 |
| (1,662) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HD12 | 4 | 1.08 | 0.02 | 1.08 |
| (1,662) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HD13 | 4 | 1.08 | 0.02 | 1.08 |
| (1,1469) | 1:A:23:GLU:H | 1:A:23:GLU:HG2 | 4 | 0.76 | 0.01 | 0.76 |
| (1,1469) | 1:A:23:GLU:H | 1:A:23:GLU:HG3 | 4 | 0.76 | 0.01 | 0.76 |
| (1,1460) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:23:GLU:HG2 | 4 | 0.72 | 0.2 | 0.72 |
| (1,1460) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:23:GLU:HG3 | 4 | 0.72 | 0.2 | 0.72 |
| (1,1466) | 1:A:22:ILE:H | 1:A:23:GLU:HG2 | 4 | 0.65 | 0.06 | 0.65 |
| (1,1466) | 1:A:22:ILE:H | 1:A:23:GLU:HG3 | 4 | 0.65 | 0.06 | 0.65 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HD11 | 4 | 0.59 | 0.06 | 0.59 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HD12 | 4 | 0.59 | 0.06 | 0.59 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HD13 | 4 | 0.59 | 0.06 | 0.59 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HD11 | 4 | 0.59 | 0.06 | 0.59 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HD12 | 4 | 0.59 | 0.06 | 0.59 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HD13 | 4 | 0.59 | 0.06 | 0.59 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HD11 | 4 | 0.59 | 0.06 | 0.59 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HD12 | 4 | 0.59 | 0.06 | 0.59 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HD13 | 4 | 0.59 | 0.06 | 0.59 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB1 | 1:A:84:LYS:HD2 | 4 | 0.55 | 0.29 | 0.57 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB1 | 1:A:84:LYS:HD3 | 4 | 0.55 | 0.29 | 0.57 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB2 | 1:A:84:LYS:HD2 | 4 | 0.55 | 0.29 | 0.57 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB2 | 1:A:84:LYS:HD3 | 4 | 0.55 | 0.29 | 0.57 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB3 | 1:A:84:LYS:HD2 | 4 | 0.55 | 0.29 | 0.57 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB3 | 1:A:84:LYS:HD3 | 4 | 0.55 | 0.29 | 0.57 |
| (1,1377) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:5:GLU:HG2 | 4 | 0.53 | 0.19 | 0.55 |
| (1,1377) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:5:GLU:HG3 | 4 | 0.53 | 0.19 | 0.55 |
| (1,1612) | 1:A:54:ASN:HA | 1:A:55:GLU:HG2 | 4 | 0.44 | 0.09 | 0.39 |
| (1,1612) | 1:A:54:ASN:HA | 1:A:55:GLU:HG3 | 4 | 0.44 | 0.09 | 0.39 |
| (1,1476) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:25:SER:H | 4 | 0.4 | 0.02 | 0.4 |
| (1,1476) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:25:SER:H | 4 | 0.4 | 0.02 | 0.4 |
| (1,1708) | 1:A:86:CYS:H | 1:A:87:ASP:HB2 | 4 | 0.39 | 0.05 | 0.4 |
| (1,1708) | 1:A:86:CYS:H | 1:A:87:ASP:HB3 | 4 | 0.39 | 0.05 | 0.4 |
| (1,1086) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:61:PRO:HD3 | 4 | 0.39 | 0.11 | 0.39 |
| (1,671) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 4 | 0.38 | 0.13 | 0.39 |
| (1,671) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 4 | 0.38 | 0.13 | 0.39 |
| (1,671) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 4 | 0.38 | 0.13 | 0.39 |
| (1,1234) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:83:ALA:HA | 4 | 0.35 | 0.09 | 0.32 |
| (1,1552) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HG2 | 4 | 0.32 | 0.03 | 0.32 |
| (1,1552) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HG3 | 4 | 0.32 | 0.03 | 0.32 |
| (1,1402) | 1:A:10:CYS:HB2 | 1:A:11:TYR:HA | 4 | 0.31 | 0.06 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1402) | 1:A:10:CYS:HB3 | 1:A:11:TYR:HA | 4 | 0.31 | 0.06 | 0.34 |
| (1,1621) | 1:A:59:SER:HB2 | 1:A:60:CYS:HA | 4 | 0.31 | 0.07 | 0.3 |
| (1,1621) | 1:A:59:SER:HB3 | 1:A:60:CYS:HA | 4 | 0.31 | 0.07 | 0.3 |
| (1,841) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HB2 | 4 | 0.31 | 0.13 | 0.34 |
| (1,1413) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HE2 | 4 | 0.28 | 0.15 | 0.28 |
| (1,1413) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HE3 | 4 | 0.28 | 0.15 | 0.28 |
| (1,200) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:H | 4 | 0.27 | 0.08 | 0.26 |
| (1,1065) | 1:A:55:GLU:HA | 1:A:55:GLU:HG3 | 4 | 0.26 | 0.0 | 0.26 |
| (1,1342) | 1:A:54:ASN:HD22 | 1:A:84:LYS:HG2 | 4 | 0.26 | 0.1 | 0.22 |
| (1,674) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD11 | 4 | 0.26 | 0.13 | 0.24 |
| (1,674) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD12 | 4 | 0.26 | 0.13 | 0.24 |
| (1,674) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD13 | 4 | 0.26 | 0.13 | 0.24 |
| (1,1394) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:8:HIS:HB2 | 4 | 0.26 | 0.13 | 0.2 |
| (1,1394) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:8:HIS:HB3 | 4 | 0.26 | 0.13 | 0.2 |
| (1,1517) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:33:LYS:HE2 | 4 | 0.25 | 0.04 | 0.24 |
| (1,1517) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:33:LYS:HE3 | 4 | 0.25 | 0.04 | 0.24 |
| (1,653) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HG | 4 | 0.22 | 0.03 | 0.22 |
| (1,98) | 1:A:55:GLU:HG3 | 1:A:56:PHE:H | 4 | 0.22 | 0.05 | 0.21 |
| (1,1422) | 1:A:14:SER:HB2 | 1:A:16:GLU:H | 4 | 0.21 | 0.1 | 0.16 |
| (1,1422) | 1:A:14:SER:HB3 | 1:A:16:GLU:H | 4 | 0.21 | 0.1 | 0.16 |
| (1,997) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HB3 | 4 | 0.19 | 0.03 | 0.18 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:HB2 | 4 | 0.18 | 0.05 | 0.2 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:HB2 | 4 | 0.18 | 0.05 | 0.2 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:HB2 | 4 | 0.18 | 0.05 | 0.2 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HB2 | 4 | 0.18 | 0.05 | 0.2 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HB2 | 4 | 0.18 | 0.05 | 0.2 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HB2 | 4 | 0.18 | 0.05 | 0.2 |
| (1,783) | 1:A:68:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.16 |
| (1,783) | 1:A:68:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.16 |
| (1,783) | 1:A:68:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.16 |
| (1,1064) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:85:LEU:HG | 4 | 0.18 | 0.06 | 0.14 |
| (1,1299) | 1:A:4:MET:HE1 | 1:A:6:LYS:H | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1299) | 1:A:4:MET:HE2 | 1:A:6:LYS:H | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1299) | 1:A:4:MET:HE3 | 1:A:6:LYS:H | 4 | 0.17 | 0.04 | 0.16 |
| (1,391) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:88:PRO:HD3 | 4 | 0.16 | 0.03 | 0.17 |
| (1,1710) | 1:A:87:ASP:H | 1:A:87:ASP:HB2 | 4 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,1710) | 1:A:87:ASP:H | 1:A:87:ASP:HB3 | 4 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,354) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:42:GLN:H | 4 | 0.16 | 0.05 | 0.14 |
| (1,1620) | 1:A:59:SER:HB2 | 1:A:60:CYS:H | 4 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,1620) | 1:A:59:SER:HB3 | 1:A:60:CYS:H | 4 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,470) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 4 | 0.15 | 0.03 | 0.14 |
| (1,1416) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:14:SER:HA | 4 | 0.14 | 0.04 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1416) | 1:A:13:LYS:HB3 | 1:A:14:SER:HA | 4 | 0.14 | 0.04 | 0.12 |
| (1,450) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:23:GLU:H | 4 | 0.14 | 0.0 | 0.14 |
| (1,1580) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:87:ASP:HB2 | 4 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1580) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:87:ASP:HB3 | 4 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:82:ASN:HD21 | 4 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:82:ASN:HD21 | 4 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:82:ASN:HD21 | 4 | 0.13 | 0.01 | 0.12 |
| (1,640) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:83:ALA:HA | 4 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,640) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:83:ALA:HA | 4 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,640) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:83:ALA:HA | 4 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,833) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HB | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,833) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HB | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,833) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HB | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,271) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:55:GLU:H | 4 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1607) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:ALA:HA | 3 | 0.75 | 0.01 | 0.75 |
| (1,1607) | 1:A:50:GLU:HG3 | 1:A:51:ALA:HA | 3 | 0.75 | 0.01 | 0.75 |
| (1,1484) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HD2 | 3 | 0.65 | 0.4 | 0.55 |
| (1,1484) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HD3 | 3 | 0.65 | 0.4 | 0.55 |
| (1,285) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:86:CYS:HB3 | 3 | 0.55 | 0.02 | 0.56 |
| (1,956) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:47:CYS:HA | 3 | 0.54 | 0.12 | 0.6 |
| (1,1408) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HE2 | 3 | 0.46 | 0.17 | 0.43 |
| (1,1408) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HE3 | 3 | 0.46 | 0.17 | 0.43 |
| (1,677) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 3 | 0.46 | 0.01 | 0.47 |
| (1,677) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 3 | 0.46 | 0.01 | 0.47 |
| (1,677) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 3 | 0.46 | 0.01 | 0.47 |
| (1,815) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 3 | 0.46 | 0.12 | 0.46 |
| (1,815) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 3 | 0.46 | 0.12 | 0.46 |
| (1,815) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 3 | 0.46 | 0.12 | 0.46 |
| (1,1272) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:H | 3 | 0.39 | 0.07 | 0.35 |
| (1,1272) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:H | 3 | 0.39 | 0.07 | 0.35 |
| (1,1272) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:H | 3 | 0.39 | 0.07 | 0.35 |
| (1,1387) | 1:A:6:LYS:HA | 1:A:6:LYS:HD2 | 3 | 0.38 | 0.11 | 0.31 |
| (1,1387) | 1:A:6:LYS:HA | 1:A:6:LYS:HD3 | 3 | 0.38 | 0.11 | 0.31 |
| (1,1276) | 1:A:43:LEU:H | 1:A:66:MET:HE1 | 3 | 0.37 | 0.17 | 0.34 |
| (1,1276) | 1:A:43:LEU:H | 1:A:66:MET:HE2 | 3 | 0.37 | 0.17 | 0.34 |
| (1,1276) | 1:A:43:LEU:H | 1:A:66:MET:HE3 | 3 | 0.37 | 0.17 | 0.34 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 3 | 0.36 | 0.01 | 0.36 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 3 | 0.36 | 0.01 | 0.36 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 3 | 0.36 | 0.01 | 0.36 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG3 | 1:A:51:ALA:HB1 | 3 | 0.36 | 0.01 | 0.36 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG3 | 1:A:51:ALA:HB2 | 3 | 0.36 | 0.01 | 0.36 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG3 | 1:A:51:ALA:HB3 | 3 | 0.36 | 0.01 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,992) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:68:ASN:HB3 | 3 | 0.35 | 0.09 | 0.33 |
| (1,1450) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HB | 3 | 0.32 | 0.25 | 0.18 |
| (1,1450) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HB | 3 | 0.32 | 0.25 | 0.18 |
| (1,318) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:52:CYS:HB2 | 3 | 0.32 | 0.15 | 0.33 |
| (1,1113) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:4:MET:HE1 | 3 | 0.31 | 0.26 | 0.13 |
| (1,1113) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:4:MET:HE2 | 3 | 0.31 | 0.26 | 0.13 |
| (1,1113) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:4:MET:HE3 | 3 | 0.31 | 0.26 | 0.13 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD11 | 3 | 0.29 | 0.12 | 0.32 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD12 | 3 | 0.29 | 0.12 | 0.32 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD13 | 3 | 0.29 | 0.12 | 0.32 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD11 | 3 | 0.29 | 0.12 | 0.32 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD12 | 3 | 0.29 | 0.12 | 0.32 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD13 | 3 | 0.29 | 0.12 | 0.32 |
| (1,1483) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HG2 | 3 | 0.29 | 0.09 | 0.32 |
| (1,1483) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HG3 | 3 | 0.29 | 0.09 | 0.32 |
| (1,1412) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HD2 | 3 | 0.28 | 0.01 | 0.28 |
| (1,1412) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HD3 | 3 | 0.28 | 0.01 | 0.28 |
| (1,1411) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HG2 | 3 | 0.28 | 0.01 | 0.27 |
| (1,1411) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HG3 | 3 | 0.28 | 0.01 | 0.27 |
| (1,1378) | 1:A:4:MET:HB2 | 1:A:6:LYS:H | 3 | 0.27 | 0.09 | 0.28 |
| (1,1378) | 1:A:4:MET:HB3 | 1:A:6:LYS:H | 3 | 0.27 | 0.09 | 0.28 |
| (1,289) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:27:MET:HG2 | 3 | 0.25 | 0.01 | 0.25 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 3 | 0.24 | 0.12 | 0.21 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 3 | 0.24 | 0.12 | 0.21 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 3 | 0.24 | 0.12 | 0.21 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 3 | 0.24 | 0.12 | 0.21 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 3 | 0.24 | 0.12 | 0.21 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 3 | 0.24 | 0.12 | 0.21 |
| (1,360) | 1:A:57:CYS:HB2 | 1:A:60:CYS:H | 3 | 0.24 | 0.02 | 0.24 |
| (1,479) | 1:A:11:TYR:HD1 | 1:A:12:TRP:H | 3 | 0.23 | 0.06 | 0.26 |
| (1,1443) | 1:A:18:GLN:HG2 | 1:A:19:SER:H | 3 | 0.22 | 0.1 | 0.15 |
| (1,1443) | 1:A:18:GLN:HG3 | 1:A:19:SER:H | 3 | 0.22 | 0.1 | 0.15 |
| (1,87) | 1:A:53:THR:HG21 | 1:A:54:ASN:H | 3 | 0.22 | 0.07 | 0.24 |
| (1,87) | 1:A:53:THR:HG22 | 1:A:54:ASN:H | 3 | 0.22 | 0.07 | 0.24 |
| (1,87) | 1:A:53:THR:HG23 | 1:A:54:ASN:H | 3 | 0.22 | 0.07 | 0.24 |
| (1,1197) | 1:A:12:TRP:HD1 | 1:A:13:LYS:HA | 3 | 0.21 | 0.03 | 0.2 |
| (1,353) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:HIS:HB2 | 3 | 0.21 | 0.06 | 0.18 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD11 | 3 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD12 | 3 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD13 | 3 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD21 | 3 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD22 | 3 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD23 | 3 | 0.19 | 0.0 | 0.19 |
| (1,756) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HB1 | 3 | 0.18 | 0.09 | 0.12 |
| (1,756) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HB2 | 3 | 0.18 | 0.09 | 0.12 |
| (1,756) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HB3 | 3 | 0.18 | 0.09 | 0.12 |
| (1,1431) | 1:A:16:GLU:HB2 | 1:A:17:PRO:HD2 | 3 | 0.18 | 0.05 | 0.2 |
| (1,1431) | 1:A:16:GLU:HB2 | 1:A:17:PRO:HD3 | 3 | 0.18 | 0.05 | 0.2 |
| (1,1431) | 1:A:16:GLU:HB3 | 1:A:17:PRO:HD2 | 3 | 0.18 | 0.05 | 0.2 |
| (1,1431) | 1:A:16:GLU:HB3 | 1:A:17:PRO:HD3 | 3 | 0.18 | 0.05 | 0.2 |
| (1,53) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:22:ILE:HD11 | 3 | 0.18 | 0.02 | 0.17 |
| (1,53) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:22:ILE:HD12 | 3 | 0.18 | 0.02 | 0.17 |
| (1,53) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:22:ILE:HD13 | 3 | 0.18 | 0.02 | 0.17 |
| (1,435) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:19:SER:H | 3 | 0.18 | 0.03 | 0.19 |
| (1,742) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 3 | 0.18 | 0.06 | 0.17 |
| (1,742) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 3 | 0.18 | 0.06 | 0.17 |
| (1,742) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 3 | 0.18 | 0.06 | 0.17 |
| (1,1054) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:65:ARG:HA | 3 | 0.17 | 0.05 | 0.18 |
| (1,1093) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD21 | 3 | 0.16 | 0.0 | 0.16 |
| (1,1093) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD22 | 3 | 0.16 | 0.0 | 0.16 |
| (1,1093) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD23 | 3 | 0.16 | 0.0 | 0.16 |
| (1,1388) | 1:A:6:LYS:HB2 | 1:A:7:LEU:H | 3 | 0.15 | 0.04 | 0.13 |
| (1,1388) | 1:A:6:LYS:HB3 | 1:A:7:LEU:H | 3 | 0.15 | 0.04 | 0.13 |
| (1,181) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:65:ARG:HB3 | 3 | 0.15 | 0.03 | 0.16 |
| (1,184) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HB2 | 3 | 0.14 | 0.05 | 0.11 |
| (1,739) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 3 | 0.14 | 0.04 | 0.12 |
| (1,739) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 3 | 0.14 | 0.04 | 0.12 |
| (1,739) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 3 | 0.14 | 0.04 | 0.12 |
| (1,1021) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HB | 3 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,1208) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:H | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1208) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:H | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1208) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:H | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.15 |
| (1,730) | 1:A:85:LEU:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 3 | 0.14 | 0.02 | 0.13 |
| (1,56) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:23:GLU:H | 3 | 0.14 | 0.01 | 0.13 |
| (1,56) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:23:GLU:H | 3 | 0.14 | 0.01 | 0.13 |
| (1,56) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:23:GLU:H | 3 | 0.14 | 0.01 | 0.13 |
| (1,275) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:57:CYS:H | 3 | 0.13 | 0.02 | 0.12 |
| (1,421) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:25:SER:H | 3 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,1692) | 1:A:83:ALA:HA | 1:A:84:LYS:HD2 | 2 | 0.9 | 0.3 | 0.9 |
| (1,1692) | 1:A:83:ALA:HA | 1:A:84:LYS:HD3 | 2 | 0.9 | 0.3 | 0.9 |
| (1,1421) | 1:A:14:SER:HA | 1:A:16:GLU:HG2 | 2 | 0.72 | 0.5 | 0.72 |
| (1,1421) | 1:A:14:SER:HA | 1:A:16:GLU:HG3 | 2 | 0.72 | 0.5 | 0.72 |
| (1,1619) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:60:CYS:HB2 | 2 | 0.63 | 0.02 | 0.63 |
| (1,1619) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:60:CYS:HB3 | 2 | 0.63 | 0.02 | 0.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,973) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:85:LEU:HD11 | 2 | 0.62 | 0.02 | 0.62 |
| (1,973) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:85:LEU:HD12 | 2 | 0.62 | 0.02 | 0.62 |
| (1,973) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:85:LEU:HD13 | 2 | 0.62 | 0.02 | 0.62 |
| (1,1604) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HG2 | 2 | 0.47 | 0.05 | 0.47 |
| (1,1604) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HG3 | 2 | 0.47 | 0.05 | 0.47 |
| (1,427) | 1:A:14:SER:HA | 1:A:15:GLY:H | 2 | 0.46 | 0.02 | 0.46 |
| (1,1695) | 1:A:83:ALA:HB1 | 1:A:84:LYS:HE2 | 2 | 0.4 | 0.06 | 0.4 |
| (1,1695) | 1:A:83:ALA:HB1 | 1:A:84:LYS:HE3 | 2 | 0.4 | 0.06 | 0.4 |
| (1,1695) | 1:A:83:ALA:HB2 | 1:A:84:LYS:HE2 | 2 | 0.4 | 0.06 | 0.4 |
| (1,1695) | 1:A:83:ALA:HB2 | 1:A:84:LYS:HE3 | 2 | 0.4 | 0.06 | 0.4 |
| (1,1695) | 1:A:83:ALA:HB3 | 1:A:84:LYS:HE2 | 2 | 0.4 | 0.06 | 0.4 |
| (1,1695) | 1:A:83:ALA:HB3 | 1:A:84:LYS:HE3 | 2 | 0.4 | 0.06 | 0.4 |
| (1,1617) | 1:A:56:PHE:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 2 | 0.39 | 0.2 | 0.39 |
| (1,1617) | 1:A:56:PHE:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 2 | 0.39 | 0.2 | 0.39 |
| (1,1617) | 1:A:56:PHE:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 2 | 0.39 | 0.2 | 0.39 |
| (1,1617) | 1:A:56:PHE:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 2 | 0.39 | 0.2 | 0.39 |
| (1,1617) | 1:A:56:PHE:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 2 | 0.39 | 0.2 | 0.39 |
| (1,1617) | 1:A:56:PHE:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 2 | 0.39 | 0.2 | 0.39 |
| (1,945) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:88:PRO:HD3 | 2 | 0.38 | 0.04 | 0.38 |
| (1,1633) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:HG2 | 2 | 0.32 | 0.2 | 0.32 |
| (1,1633) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:HG2 | 2 | 0.32 | 0.2 | 0.32 |
| (1,1633) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:HG2 | 2 | 0.32 | 0.2 | 0.32 |
| (1,1633) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HG2 | 2 | 0.32 | 0.2 | 0.32 |
| (1,1633) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HG2 | 2 | 0.32 | 0.2 | 0.32 |
| (1,1633) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HG2 | 2 | 0.32 | 0.2 | 0.32 |
| (1,789) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HG2 | 2 | 0.32 | 0.05 | 0.32 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HE1 | 2 | 0.31 | 0.03 | 0.31 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HE2 | 2 | 0.31 | 0.03 | 0.31 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HE3 | 2 | 0.31 | 0.03 | 0.31 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HE1 | 2 | 0.31 | 0.03 | 0.31 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HE2 | 2 | 0.31 | 0.03 | 0.31 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HE3 | 2 | 0.31 | 0.03 | 0.31 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HE1 | 2 | 0.31 | 0.03 | 0.31 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HE2 | 2 | 0.31 | 0.03 | 0.31 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HE3 | 2 | 0.31 | 0.03 | 0.31 |
| (1,1286) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:H | 2 | 0.31 | 0.1 | 0.31 |
| (1,1438) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:18:GLN:HE21 | 2 | 0.3 | 0.1 | 0.3 |
| (1,1438) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:18:GLN:HE22 | 2 | 0.3 | 0.1 | 0.3 |
| (1,922) | 1:A:66:MET:HG2 | 1:A:70:ALA:HB1 | 2 | 0.3 | 0.05 | 0.3 |
| (1,922) | 1:A:66:MET:HG2 | 1:A:70:ALA:HB2 | 2 | 0.3 | 0.05 | 0.3 |
| (1,922) | 1:A:66:MET:HG2 | 1:A:70:ALA:HB3 | 2 | 0.3 | 0.05 | 0.3 |
| (1,1142) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:39:TYR:HE2 | 2 | 0.3 | 0.15 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,220) | 1:A:25:SER:H | 1:A:27:MET:HE1 | 2 | 0.28 | 0.16 | 0.28 |
| (1,220) | 1:A:25:SER:H | 1:A:27:MET:HE2 | 2 | 0.28 | 0.16 | 0.28 |
| (1,220) | 1:A:25:SER:H | 1:A:27:MET:HE3 | 2 | 0.28 | 0.16 | 0.28 |
| (1,385) | 1:A:87:ASP:H | 1:A:88:PRO:HD3 | 2 | 0.27 | 0.1 | 0.27 |
| (1,1693) | 1:A:83:ALA:HA | 1:A:84:LYS:HE2 | 2 | 0.26 | 0.01 | 0.26 |
| (1,1693) | 1:A:83:ALA:HA | 1:A:84:LYS:HE3 | 2 | 0.26 | 0.01 | 0.26 |
| (1,1399) | 1:A:9:GLN:HA | 1:A:9:GLN:HE21 | 2 | 0.26 | 0.05 | 0.26 |
| (1,1399) | 1:A:9:GLN:HA | 1:A:9:GLN:HE22 | 2 | 0.26 | 0.05 | 0.26 |
| (1,1379) | 1:A:4:MET:HG2 | 1:A:5:GLU:H | 2 | 0.25 | 0.01 | 0.25 |
| (1,1379) | 1:A:4:MET:HG3 | 1:A:5:GLU:H | 2 | 0.25 | 0.01 | 0.25 |
| (1,1441) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:HB2 | 2 | 0.22 | 0.07 | 0.22 |
| (1,1441) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:HB3 | 2 | 0.22 | 0.07 | 0.22 |
| (1,1441) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:HB2 | 2 | 0.22 | 0.07 | 0.22 |
| (1,1441) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:HB3 | 2 | 0.22 | 0.07 | 0.22 |
| (1,265) | 1:A:66:MET:HG2 | 1:A:67:ASP:H | 2 | 0.21 | 0.07 | 0.21 |
| (1,1415) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:14:SER:H | 2 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (1,1415) | 1:A:13:LYS:HB3 | 1:A:14:SER:H | 2 | 0.2 | 0.0 | 0.2 |
| (1,1240) | 1:A:52:CYS:H | 1:A:60:CYS:HA | 2 | 0.2 | 0.06 | 0.2 |
| (1,1192) | 1:A:79:TYR:HD1 | 1:A:80:LYS:HA | 2 | 0.18 | 0.0 | 0.18 |
| (1,292) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:86:CYS:H | 2 | 0.18 | 0.06 | 0.18 |
| (1,505) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:52:CYS:H | 2 | 0.18 | 0.04 | 0.18 |
| (1,1554) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:85:LEU:HD11 | 2 | 0.17 | 0.05 | 0.17 |
| (1,1554) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:85:LEU:HD12 | 2 | 0.17 | 0.05 | 0.17 |
| (1,1554) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:85:LEU:HD13 | 2 | 0.17 | 0.05 | 0.17 |
| (1,1554) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:85:LEU:HD21 | 2 | 0.17 | 0.05 | 0.17 |
| (1,1554) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:85:LEU:HD22 | 2 | 0.17 | 0.05 | 0.17 |
| (1,1554) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:85:LEU:HD23 | 2 | 0.17 | 0.05 | 0.17 |
| (1,1495) | 1:A:28:LYS:H | 1:A:28:LYS:HG2 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1495) | 1:A:28:LYS:H | 1:A:28:LYS:HG3 | 2 | 0.16 | 0.04 | 0.16 |
| (1,1097) | 1:A:6:LYS:HA | 1:A:6:LYS:HG3 | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,1718) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HA | 2 | 0.16 | 0.05 | 0.16 |
| (1,1718) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HA | 2 | 0.16 | 0.05 | 0.16 |
| (1,154) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:57:CYS:H | 2 | 0.16 | 0.02 | 0.16 |
| (1,1540) | 1:A:35:LEU:HD11 | 1:A:82:ASN:HA | 2 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (1,1540) | 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:82:ASN:HA | 2 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (1,1540) | 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:82:ASN:HA | 2 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (1,1540) | 1:A:35:LEU:HD21 | 1:A:82:ASN:HA | 2 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (1,1540) | 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:82:ASN:HA | 2 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (1,1540) | 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:82:ASN:HA | 2 | 0.16 | 0.01 | 0.16 |
| (1,229) | 1:A:26:ARG:H | 1:A:27:MET:HB3 | 2 | 0.15 | 0.04 | 0.15 |
| (1,680) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HG21 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,680) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HG22 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

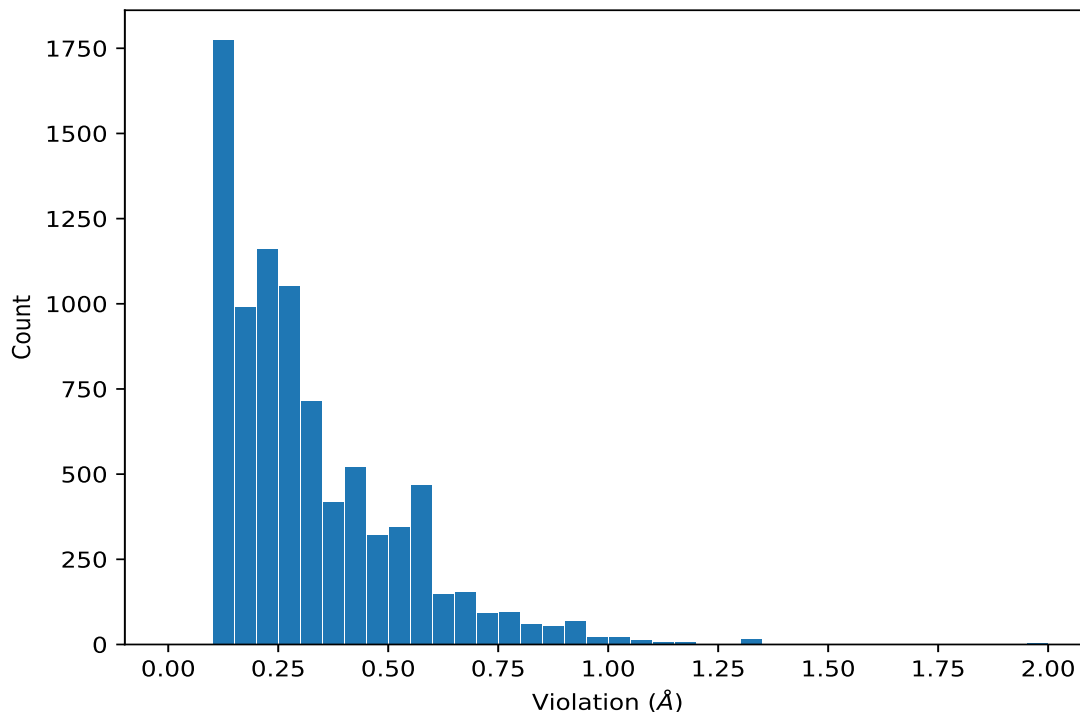
| Key | Atom-1 | Atom-2 | Models ¹ | Mean (Å) | SD ¹ (Å) | Median (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (1,680) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HG23 | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,831) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:HA | 2 | 0.15 | 0.03 | 0.15 |
| (1,1491) | 1:A:26:ARG:HD2 | 1:A:27:MET:H | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,1491) | 1:A:26:ARG:HD3 | 1:A:27:MET:H | 2 | 0.15 | 0.02 | 0.15 |
| (1,769) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:24:ALA:HB1 | 2 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (1,769) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:24:ALA:HB2 | 2 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (1,769) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:24:ALA:HB3 | 2 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (1,140) | 1:A:68:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB1 | 2 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (1,140) | 1:A:68:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB2 | 2 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (1,140) | 1:A:68:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB3 | 2 | 0.14 | 0.03 | 0.14 |
| (1,389) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:H | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:82:ASN:H | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:82:ASN:H | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:82:ASN:H | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,546) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:72:ALA:H | 2 | 0.14 | 0.01 | 0.14 |
| (1,1510) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD11 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1510) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1510) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD13 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1510) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD21 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1510) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD22 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,1510) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD23 | 2 | 0.14 | 0.02 | 0.14 |
| (1,985) | 1:A:79:TYR:HB2 | 1:A:80:LYS:HA | 2 | 0.13 | 0.01 | 0.13 |
| (1,1191) | 1:A:76:LEU:HD11 | 1:A:79:TYR:HD1 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1191) | 1:A:76:LEU:HD12 | 1:A:79:TYR:HD1 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,1191) | 1:A:76:LEU:HD13 | 1:A:79:TYR:HD1 | 2 | 0.12 | 0.02 | 0.12 |
| (1,525) | 1:A:11:TYR:H | 1:A:12:TRP:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1001) | 1:A:12:TRP:HB2 | 1:A:13:LYS:HA | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1029) | 1:A:89:HIS:HA | 1:A:90:PRO:HD2 | 2 | 0.12 | 0.01 | 0.12 |
| (1,28) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:HB1 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,28) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:HB2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,28) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:HB3 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,311) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:H | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,682) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,682) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,682) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,788) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:HB1 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,788) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:HB2 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,788) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:HB3 | 2 | 0.12 | 0.0 | 0.12 |
| (1,1282) | 1:A:10:CYS:HA | 1:A:11:TYR:H | 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) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG21 | 15 | 1.98 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG22 | 15 | 1.98 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG23 | 15 | 1.98 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG21 | 15 | 1.32 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG22 | 15 | 1.32 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG23 | 15 | 1.32 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD11 | 1:A:38:ARG:HD2 | 16 | 1.32 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD11 | 1:A:38:ARG:HD3 | 16 | 1.32 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:38:ARG:HD2 | 16 | 1.32 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:38:ARG:HD3 | 16 | 1.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:38:ARG:HD2 | 16 | 1.32 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:38:ARG:HD3 | 16 | 1.32 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD21 | 1:A:38:ARG:HD2 | 16 | 1.32 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD21 | 1:A:38:ARG:HD3 | 16 | 1.32 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:38:ARG:HD2 | 16 | 1.32 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:38:ARG:HD3 | 16 | 1.32 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:38:ARG:HD2 | 16 | 1.32 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:38:ARG:HD3 | 16 | 1.32 |
| (1,1421) | 1:A:14:SER:HA | 1:A:16:GLU:HG2 | 9 | 1.22 |
| (1,1421) | 1:A:14:SER:HA | 1:A:16:GLU:HG3 | 9 | 1.22 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE1 | 1:A:7:LEU:HG | 19 | 1.2 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE2 | 1:A:7:LEU:HG | 19 | 1.2 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE3 | 1:A:7:LEU:HG | 19 | 1.2 |
| (1,1692) | 1:A:83:ALA:HA | 1:A:84:LYS:HD2 | 14 | 1.2 |
| (1,1692) | 1:A:83:ALA:HA | 1:A:84:LYS:HD3 | 14 | 1.2 |
| (1,1484) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HD2 | 1 | 1.19 |
| (1,1484) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HD3 | 1 | 1.19 |
| (1,662) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HD11 | 19 | 1.11 |
| (1,662) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HD12 | 19 | 1.11 |
| (1,662) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HD13 | 19 | 1.11 |
| (1,662) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HD11 | 14 | 1.1 |
| (1,662) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HD12 | 14 | 1.1 |
| (1,662) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HD13 | 14 | 1.1 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 16 | 1.09 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 13 | 1.08 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE1 | 1:A:7:LEU:HG | 12 | 1.07 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE2 | 1:A:7:LEU:HG | 12 | 1.07 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE3 | 1:A:7:LEU:HG | 12 | 1.07 |
| (1,662) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HD11 | 10 | 1.06 |
| (1,662) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HD12 | 10 | 1.06 |
| (1,662) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HD13 | 10 | 1.06 |
| (1,662) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HD11 | 17 | 1.06 |
| (1,662) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HD12 | 17 | 1.06 |
| (1,662) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HD13 | 17 | 1.06 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 14 | 1.05 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:86:CYS:H | 16 | 1.02 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:86:CYS:H | 16 | 1.02 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:86:CYS:H | 16 | 1.02 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:86:CYS:H | 17 | 1.02 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:86:CYS:H | 17 | 1.02 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:86:CYS:H | 17 | 1.02 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 12 | 1.02 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD11 | 1:A:38:ARG:HD2 | 6 | 1.02 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD11 | 1:A:38:ARG:HD3 | 6 | 1.02 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:38:ARG:HD2 | 6 | 1.02 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:38:ARG:HD3 | 6 | 1.02 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:38:ARG:HD2 | 6 | 1.02 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:38:ARG:HD3 | 6 | 1.02 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD21 | 1:A:38:ARG:HD2 | 6 | 1.02 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD21 | 1:A:38:ARG:HD3 | 6 | 1.02 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:38:ARG:HD2 | 6 | 1.02 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:38:ARG:HD3 | 6 | 1.02 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:38:ARG:HD2 | 6 | 1.02 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:38:ARG:HD3 | 6 | 1.02 |
| (1,325) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:H | 7 | 1.01 |
| (1,257) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 7 | 1.01 |
| (1,257) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 6 | 1.0 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:86:CYS:H | 14 | 0.99 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:86:CYS:H | 14 | 0.99 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:86:CYS:H | 14 | 0.99 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:86:CYS:H | 15 | 0.99 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:86:CYS:H | 15 | 0.99 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:86:CYS:H | 15 | 0.99 |
| (1,257) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 17 | 0.99 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 3 | 0.98 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 18 | 0.98 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB2 | 1:A:62:THR:H | 3 | 0.97 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB3 | 1:A:62:THR:H | 3 | 0.97 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:86:CYS:H | 20 | 0.96 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:86:CYS:H | 20 | 0.96 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:86:CYS:H | 20 | 0.96 |
| (1,257) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 15 | 0.96 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB1 | 14 | 0.96 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB2 | 14 | 0.96 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB3 | 14 | 0.96 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB1 | 14 | 0.96 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB2 | 14 | 0.96 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB3 | 14 | 0.96 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 20 | 0.95 |
| (1,257) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 8 | 0.94 |
| (1,257) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 12 | 0.94 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB1 | 1:A:84:LYS:HD2 | 14 | 0.94 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB1 | 1:A:84:LYS:HD3 | 14 | 0.94 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB2 | 1:A:84:LYS:HD2 | 14 | 0.94 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB2 | 1:A:84:LYS:HD3 | 14 | 0.94 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB3 | 1:A:84:LYS:HD2 | 14 | 0.94 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB3 | 1:A:84:LYS:HD3 | 14 | 0.94 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD11 | 1:A:38:ARG:HD2 | 19 | 0.94 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD11 | 1:A:38:ARG:HD3 | 19 | 0.94 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:38:ARG:HD2 | 19 | 0.94 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:38:ARG:HD3 | 19 | 0.94 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:38:ARG:HD2 | 19 | 0.94 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:38:ARG:HD3 | 19 | 0.94 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD21 | 1:A:38:ARG:HD2 | 19 | 0.94 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD21 | 1:A:38:ARG:HD3 | 19 | 0.94 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:38:ARG:HD2 | 19 | 0.94 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:38:ARG:HD3 | 19 | 0.94 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:38:ARG:HD2 | 19 | 0.94 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:38:ARG:HD3 | 19 | 0.94 |
| (1,1460) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:23:GLU:HG2 | 8 | 0.94 |
| (1,1460) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:23:GLU:HG3 | 8 | 0.94 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:86:CYS:H | 8 | 0.93 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:86:CYS:H | 8 | 0.93 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:86:CYS:H | 8 | 0.93 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG2 | 4 | 0.93 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG3 | 4 | 0.93 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG2 | 4 | 0.93 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG3 | 4 | 0.93 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:86:CYS:H | 7 | 0.92 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:86:CYS:H | 7 | 0.92 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:86:CYS:H | 7 | 0.92 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:86:CYS:H | 11 | 0.92 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:86:CYS:H | 11 | 0.92 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:86:CYS:H | 11 | 0.92 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:86:CYS:H | 12 | 0.92 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:86:CYS:H | 12 | 0.92 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:86:CYS:H | 12 | 0.92 |
| (1,257) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 5 | 0.92 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 5 | 0.91 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 5 | 0.91 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 5 | 0.91 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 5 | 0.91 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 5 | 0.91 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 5 | 0.91 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 5 | 0.91 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 5 | 0.91 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 5 | 0.91 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:86:CYS:H | 1 | 0.91 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:86:CYS:H | 1 | 0.91 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:86:CYS:H | 1 | 0.91 |
| (1,257) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 13 | 0.91 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 6 | 0.9 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:86:CYS:H | 6 | 0.9 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:86:CYS:H | 6 | 0.9 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:86:CYS:H | 6 | 0.9 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG2 | 2 | 0.9 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG3 | 2 | 0.9 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG2 | 2 | 0.9 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG3 | 2 | 0.9 |
| (1,1460) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:23:GLU:HG2 | 2 | 0.9 |
| (1,1460) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:23:GLU:HG3 | 2 | 0.9 |
| (1,1445) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HG12 | 20 | 0.9 |
| (1,1445) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HG13 | 20 | 0.9 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD11 | 1 | 0.9 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD12 | 1 | 0.9 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD13 | 1 | 0.9 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 11 | 0.89 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 6 | 0.89 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 20 | 0.88 |
| (1,257) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 10 | 0.88 |
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 14 | 0.88 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 8 | 0.87 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 8 | 0.87 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 8 | 0.87 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 8 | 0.87 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 8 | 0.87 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 8 | 0.87 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 8 | 0.87 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 8 | 0.87 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 8 | 0.87 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HA | 14 | 0.87 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HA | 14 | 0.87 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HA | 14 | 0.87 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 18 | 0.86 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 18 | 0.86 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 18 | 0.86 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 18 | 0.86 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 18 | 0.86 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 18 | 0.86 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 18 | 0.86 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 18 | 0.86 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 18 | 0.86 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:86:CYS:H | 5 | 0.86 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:86:CYS:H | 5 | 0.86 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:86:CYS:H | 5 | 0.86 |
| (1,325) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:H | 8 | 0.86 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 10 | 0.86 |
| (1,180) | 1:A:88:PRO:HB2 | 1:A:89:HIS:H | 13 | 0.86 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG2 | 11 | 0.86 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG3 | 11 | 0.86 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG2 | 11 | 0.86 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG3 | 11 | 0.86 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 18 | 0.86 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 18 | 0.86 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 18 | 0.86 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 18 | 0.86 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 18 | 0.86 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 18 | 0.86 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 18 | 0.86 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 18 | 0.86 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 18 | 0.86 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 18 | 0.86 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 18 | 0.86 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 18 | 0.86 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 18 | 0.86 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 18 | 0.86 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 18 | 0.86 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 18 | 0.86 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 18 | 0.86 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 18 | 0.86 |
| (1,239) | 1:A:61:PRO:HG2 | 1:A:63:PHE:H | 10 | 0.85 |
| (1,180) | 1:A:88:PRO:HB2 | 1:A:89:HIS:H | 16 | 0.85 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD11 | 3 | 0.85 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD12 | 3 | 0.85 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD13 | 3 | 0.85 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 8 | 0.84 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:86:CYS:H | 19 | 0.84 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:86:CYS:H | 19 | 0.84 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:86:CYS:H | 19 | 0.84 |
| (1,257) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 18 | 0.84 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,239) | 1:A:61:PRO:HG2 | 1:A:63:PHE:H | 19 | 0.84 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD11 | 17 | 0.83 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD12 | 17 | 0.83 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD13 | 17 | 0.83 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD11 | 17 | 0.83 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD12 | 17 | 0.83 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD13 | 17 | 0.83 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD11 | 17 | 0.83 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD12 | 17 | 0.83 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD13 | 17 | 0.83 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 19 | 0.82 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 19 | 0.82 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 19 | 0.82 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 19 | 0.82 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 19 | 0.82 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 19 | 0.82 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 19 | 0.82 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 19 | 0.82 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 19 | 0.82 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 11 | 0.82 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 17 | 0.82 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 5 | 0.82 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 5 | 0.82 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 5 | 0.82 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 5 | 0.82 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 5 | 0.82 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 5 | 0.82 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 5 | 0.82 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 5 | 0.82 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 5 | 0.82 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 5 | 0.82 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 5 | 0.82 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 5 | 0.82 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 5 | 0.82 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 5 | 0.82 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 5 | 0.82 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 5 | 0.82 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 5 | 0.82 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 5 | 0.82 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 5 | 0.82 |
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 20 | 0.82 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 8 | 0.81 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 16 | 0.81 |
| (1,180) | 1:A:88:PRO:HB2 | 1:A:89:HIS:H | 3 | 0.81 |
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 7 | 0.81 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 15 | 0.8 |
| (1,239) | 1:A:61:PRO:HG2 | 1:A:63:PHE:H | 12 | 0.8 |
| (1,180) | 1:A:88:PRO:HB2 | 1:A:89:HIS:H | 20 | 0.8 |
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 11 | 0.8 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HE3 | 7 | 0.79 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HE3 | 7 | 0.79 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HE3 | 7 | 0.79 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 17 | 0.79 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 20 | 0.79 |
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 3 | 0.79 |
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 16 | 0.79 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HA | 16 | 0.78 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HA | 16 | 0.78 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HA | 16 | 0.78 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HA | 20 | 0.78 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HA | 20 | 0.78 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HA | 20 | 0.78 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 5 | 0.78 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 14 | 0.78 |
| (1,1469) | 1:A:23:GLU:H | 1:A:23:GLU:HG2 | 8 | 0.78 |
| (1,1469) | 1:A:23:GLU:H | 1:A:23:GLU:HG3 | 8 | 0.78 |
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 1 | 0.78 |
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 4 | 0.78 |
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 18 | 0.78 |
| (1,903) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:61:PRO:HB3 | 9 | 0.77 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 18 | 0.77 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 18 | 0.77 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 18 | 0.77 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 18 | 0.77 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 18 | 0.77 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 18 | 0.77 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 18 | 0.77 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 18 | 0.77 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 18 | 0.77 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD11 | 15 | 0.77 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD12 | 15 | 0.77 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD13 | 15 | 0.77 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD11 | 15 | 0.77 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD12 | 15 | 0.77 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD13 | 15 | 0.77 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD11 | 15 | 0.77 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD12 | 15 | 0.77 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD13 | 15 | 0.77 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 12 | 0.77 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG2 | 18 | 0.77 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG3 | 18 | 0.77 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG2 | 18 | 0.77 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG3 | 18 | 0.77 |
| (1,1469) | 1:A:23:GLU:H | 1:A:23:GLU:HG2 | 15 | 0.77 |
| (1,1469) | 1:A:23:GLU:H | 1:A:23:GLU:HG3 | 15 | 0.77 |
| (1,1377) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:5:GLU:HG2 | 11 | 0.77 |
| (1,1377) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:5:GLU:HG3 | 11 | 0.77 |
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 2 | 0.77 |
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 15 | 0.77 |
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 17 | 0.77 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 17 | 0.76 |
| (1,239) | 1:A:61:PRO:HG2 | 1:A:63:PHE:H | 20 | 0.76 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG2 | 9 | 0.76 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG3 | 9 | 0.76 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG2 | 9 | 0.76 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG3 | 9 | 0.76 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG2 | 19 | 0.76 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG3 | 19 | 0.76 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG2 | 19 | 0.76 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG3 | 19 | 0.76 |
| (1,1607) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:ALA:HA | 19 | 0.76 |
| (1,1607) | 1:A:50:GLU:HG3 | 1:A:51:ALA:HA | 19 | 0.76 |
| (1,1469) | 1:A:23:GLU:H | 1:A:23:GLU:HG2 | 3 | 0.76 |
| (1,1469) | 1:A:23:GLU:H | 1:A:23:GLU:HG3 | 3 | 0.76 |
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 6 | 0.76 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 7 | 0.75 |
| (1,903) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:61:PRO:HB3 | 20 | 0.75 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 8 | 0.75 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 18 | 0.75 |
| (1,257) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 14 | 0.75 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB2 | 1:A:62:THR:H | 14 | 0.75 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB3 | 1:A:62:THR:H | 14 | 0.75 |
| (1,1607) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:ALA:HA | 5 | 0.75 |
| (1,1607) | 1:A:50:GLU:HG3 | 1:A:51:ALA:HA | 5 | 0.75 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 8 | 0.75 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 8 | 0.75 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 8 | 0.75 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 8 | 0.75 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 8 | 0.75 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 8 | 0.75 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 8 | 0.75 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 8 | 0.75 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 8 | 0.75 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 8 | 0.75 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 8 | 0.75 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 8 | 0.75 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 8 | 0.75 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 8 | 0.75 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 8 | 0.75 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 8 | 0.75 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 8 | 0.75 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 8 | 0.75 |
| (1,1231) | 1:A:55:GLU:HG3 | 1:A:56:PHE:HD1 | 5 | 0.75 |
| (1,1231) | 1:A:55:GLU:HG3 | 1:A:56:PHE:HD1 | 18 | 0.75 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HA | 12 | 0.74 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HA | 12 | 0.74 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HA | 12 | 0.74 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD11 | 1:A:74:LYS:HE2 | 4 | 0.74 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD12 | 1:A:74:LYS:HE2 | 4 | 0.74 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD13 | 1:A:74:LYS:HE2 | 4 | 0.74 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD11 | 1:A:38:ARG:HD2 | 17 | 0.74 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD11 | 1:A:38:ARG:HD3 | 17 | 0.74 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:38:ARG:HD2 | 17 | 0.74 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:38:ARG:HD3 | 17 | 0.74 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:38:ARG:HD2 | 17 | 0.74 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:38:ARG:HD3 | 17 | 0.74 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD21 | 1:A:38:ARG:HD2 | 17 | 0.74 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD21 | 1:A:38:ARG:HD3 | 17 | 0.74 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:38:ARG:HD2 | 17 | 0.74 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:38:ARG:HD3 | 17 | 0.74 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:38:ARG:HD2 | 17 | 0.74 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:38:ARG:HD3 | 17 | 0.74 |
| (1,1469) | 1:A:23:GLU:H | 1:A:23:GLU:HG2 | 2 | 0.74 |
| (1,1469) | 1:A:23:GLU:H | 1:A:23:GLU:HG3 | 2 | 0.74 |
| (1,1231) | 1:A:55:GLU:HG3 | 1:A:56:PHE:HD1 | 20 | 0.74 |
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 19 | 0.74 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 2 | 0.74 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 9 | 0.74 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,827) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HG2 | 6 | 0.73 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 13 | 0.73 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 13 | 0.73 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 13 | 0.73 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 13 | 0.73 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 13 | 0.73 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 13 | 0.73 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 13 | 0.73 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 13 | 0.73 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 13 | 0.73 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 10 | 0.73 |
| (1,239) | 1:A:61:PRO:HG2 | 1:A:63:PHE:H | 6 | 0.73 |
| (1,180) | 1:A:88:PRO:HB2 | 1:A:89:HIS:H | 14 | 0.73 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG2 | 14 | 0.73 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG3 | 14 | 0.73 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG2 | 14 | 0.73 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG3 | 14 | 0.73 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG2 | 15 | 0.73 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG3 | 15 | 0.73 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG2 | 15 | 0.73 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG3 | 15 | 0.73 |
| (1,1607) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:ALA:HA | 20 | 0.73 |
| (1,1607) | 1:A:50:GLU:HG3 | 1:A:51:ALA:HA | 20 | 0.73 |
| (1,1466) | 1:A:22:ILE:H | 1:A:23:GLU:HG2 | 8 | 0.73 |
| (1,1466) | 1:A:22:ILE:H | 1:A:23:GLU:HG3 | 8 | 0.73 |
| (1,1231) | 1:A:55:GLU:HG3 | 1:A:56:PHE:HD1 | 10 | 0.73 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 4 | 0.73 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 10 | 0.73 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 4 | 0.72 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 12 | 0.72 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 12 | 0.72 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 12 | 0.72 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 3 | 0.72 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 14 | 0.72 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 5 | 0.72 |
| (1,325) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:H | 1 | 0.72 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 1 | 0.72 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB2 | 1:A:62:THR:H | 11 | 0.72 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB3 | 1:A:62:THR:H | 11 | 0.72 |
| (1,1492) | 1:A:26:ARG:HD2 | 1:A:27:MET:HA | 2 | 0.72 |
| (1,1492) | 1:A:26:ARG:HD3 | 1:A:27:MET:HA | 2 | 0.72 |
| (1,1236) | 1:A:50:GLU:HA | 1:A:52:CYS:H | 15 | 0.72 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 8 | 0.72 |
| (1,894) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:27:MET:HB3 | 6 | 0.71 |
| (1,827) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HG2 | 4 | 0.71 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 14 | 0.71 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 14 | 0.71 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 14 | 0.71 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 14 | 0.71 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 14 | 0.71 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 14 | 0.71 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 14 | 0.71 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 14 | 0.71 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 14 | 0.71 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 11 | 0.71 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 6 | 0.71 |
| (1,257) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 3 | 0.71 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD21 | 2 | 0.71 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD22 | 2 | 0.71 |
| (1,1572) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 16 | 0.71 |
| (1,1572) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 16 | 0.71 |
| (1,1445) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HG12 | 13 | 0.71 |
| (1,1445) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HG13 | 13 | 0.71 |
| (1,1236) | 1:A:50:GLU:HA | 1:A:52:CYS:H | 19 | 0.71 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:75:ALA:HA | 17 | 0.71 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:75:ALA:HA | 17 | 0.71 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:75:ALA:HA | 17 | 0.71 |
| (1,903) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:61:PRO:HB3 | 3 | 0.7 |
| (1,827) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HG2 | 13 | 0.7 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 2 | 0.7 |
| (1,239) | 1:A:61:PRO:HG2 | 1:A:63:PHE:H | 9 | 0.7 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:27:MET:H | 6 | 0.7 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:27:MET:H | 6 | 0.7 |
| (1,1458) | 1:A:20:ASP:HB2 | 1:A:23:GLU:HB3 | 9 | 0.7 |
| (1,1458) | 1:A:20:ASP:HB3 | 1:A:23:GLU:HB3 | 9 | 0.7 |
| (1,894) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:27:MET:HB3 | 13 | 0.69 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 1 | 0.69 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 3 | 0.69 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 6 | 0.69 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 20 | 0.69 |
| (1,1572) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 7 | 0.69 |
| (1,1572) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 7 | 0.69 |
| (1,1572) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 20 | 0.69 |
| (1,1572) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 20 | 0.69 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1408) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HE2 | 15 | 0.69 |
| (1,1408) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HE3 | 15 | 0.69 |
| (1,1250) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:68:ASN:HD21 | 1 | 0.69 |
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 5 | 0.69 |
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 9 | 0.69 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 3 | 0.69 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 9 | 0.68 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD11 | 1:A:74:LYS:HE2 | 13 | 0.68 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD12 | 1:A:74:LYS:HE2 | 13 | 0.68 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD13 | 1:A:74:LYS:HE2 | 13 | 0.68 |
| (1,214) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:63:PHE:H | 16 | 0.68 |
| (1,180) | 1:A:88:PRO:HB2 | 1:A:89:HIS:H | 6 | 0.68 |
| (1,180) | 1:A:88:PRO:HB2 | 1:A:89:HIS:H | 12 | 0.68 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD21 | 17 | 0.68 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD22 | 17 | 0.68 |
| (1,1458) | 1:A:20:ASP:HB2 | 1:A:23:GLU:HB3 | 1 | 0.68 |
| (1,1458) | 1:A:20:ASP:HB3 | 1:A:23:GLU:HB3 | 1 | 0.68 |
| (1,1450) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HB | 13 | 0.68 |
| (1,1450) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HB | 13 | 0.68 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 20 | 0.68 |
| (1,1123) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:24:ALA:HA | 14 | 0.68 |
| (1,1113) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:4:MET:HE1 | 11 | 0.68 |
| (1,1113) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:4:MET:HE2 | 11 | 0.68 |
| (1,1113) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:4:MET:HE3 | 11 | 0.68 |
| (1,941) | 1:A:23:GLU:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 2 | 0.67 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 2 | 0.67 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 5 | 0.67 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 16 | 0.67 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 20 | 0.67 |
| (1,257) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 19 | 0.67 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 7 | 0.67 |
| (1,180) | 1:A:88:PRO:HB2 | 1:A:89:HIS:H | 10 | 0.67 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB2 | 1:A:62:THR:H | 20 | 0.67 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB3 | 1:A:62:THR:H | 20 | 0.67 |
| (1,152) | 1:A:26:ARG:HG2 | 1:A:27:MET:H | 18 | 0.67 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 14 | 0.67 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 14 | 0.67 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 14 | 0.67 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 14 | 0.67 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 14 | 0.67 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 14 | 0.67 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 14 | 0.67 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 14 | 0.67 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 14 | 0.67 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 14 | 0.67 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 14 | 0.67 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 14 | 0.67 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 14 | 0.67 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 14 | 0.67 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 14 | 0.67 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 14 | 0.67 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 14 | 0.67 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 14 | 0.67 |
| (1,1466) | 1:A:22:ILE:H | 1:A:23:GLU:HG2 | 3 | 0.67 |
| (1,1466) | 1:A:22:ILE:H | 1:A:23:GLU:HG3 | 3 | 0.67 |
| (1,1458) | 1:A:20:ASP:HB2 | 1:A:23:GLU:HB3 | 4 | 0.67 |
| (1,1458) | 1:A:20:ASP:HB3 | 1:A:23:GLU:HB3 | 4 | 0.67 |
| (1,1445) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HG12 | 16 | 0.67 |
| (1,1445) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HG13 | 16 | 0.67 |
| (1,1236) | 1:A:50:GLU:HA | 1:A:52:CYS:H | 3 | 0.67 |
| (1,1236) | 1:A:50:GLU:HA | 1:A:52:CYS:H | 14 | 0.67 |
| (1,1236) | 1:A:50:GLU:HA | 1:A:52:CYS:H | 20 | 0.67 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 1 | 0.67 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 6 | 0.67 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 14 | 0.67 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 15 | 0.67 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 16 | 0.67 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 18 | 0.67 |
| (1,956) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:47:CYS:HA | 9 | 0.66 |
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 3 | 0.66 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 5 | 0.66 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 5 | 0.66 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 5 | 0.66 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 5 | 0.66 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 5 | 0.66 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 5 | 0.66 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 5 | 0.66 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 5 | 0.66 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 5 | 0.66 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HA | 3 | 0.66 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HA | 3 | 0.66 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HA | 3 | 0.66 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 14 | 0.66 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 14 | 0.66 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 14 | 0.66 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD11 | 1:A:74:LYS:HE2 | 8 | 0.66 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD12 | 1:A:74:LYS:HE2 | 8 | 0.66 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD13 | 1:A:74:LYS:HE2 | 8 | 0.66 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HD11 | 14 | 0.66 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HD12 | 14 | 0.66 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HD13 | 14 | 0.66 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HD11 | 14 | 0.66 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HD12 | 14 | 0.66 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HD13 | 14 | 0.66 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HD11 | 14 | 0.66 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HD12 | 14 | 0.66 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HD13 | 14 | 0.66 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 2 | 0.66 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 19 | 0.66 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 15 | 0.66 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 20 | 0.66 |
| (1,214) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:63:PHE:H | 4 | 0.66 |
| (1,180) | 1:A:88:PRO:HB2 | 1:A:89:HIS:H | 18 | 0.66 |
| (1,1714) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:HB2 | 14 | 0.66 |
| (1,1714) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:HB3 | 14 | 0.66 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD21 | 5 | 0.66 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD22 | 5 | 0.66 |
| (1,1492) | 1:A:26:ARG:HD2 | 1:A:27:MET:HA | 7 | 0.66 |
| (1,1492) | 1:A:26:ARG:HD3 | 1:A:27:MET:HA | 7 | 0.66 |
| (1,1492) | 1:A:26:ARG:HD2 | 1:A:27:MET:HA | 12 | 0.66 |
| (1,1492) | 1:A:26:ARG:HD3 | 1:A:27:MET:HA | 12 | 0.66 |
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG2 | 1:A:7:LEU:H | 1 | 0.66 |
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG3 | 1:A:7:LEU:H | 1 | 0.66 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 4 | 0.66 |
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 13 | 0.66 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 3 | 0.66 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 10 | 0.66 |
| (1,941) | 1:A:23:GLU:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 15 | 0.65 |
| (1,894) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:27:MET:HB3 | 16 | 0.65 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 14 | 0.65 |
| (1,857) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:23:GLU:HB3 | 4 | 0.65 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 9 | 0.65 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 9 | 0.65 |
| (1,1619) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:60:CYS:HB2 | 7 | 0.65 |
| (1,1619) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:60:CYS:HB3 | 7 | 0.65 |
| (1,1572) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 9 | 0.65 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1572) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 9 | 0.65 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD11 | 13 | 0.65 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 13 | 0.65 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD13 | 13 | 0.65 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD21 | 13 | 0.65 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD22 | 13 | 0.65 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD23 | 13 | 0.65 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 15 | 0.65 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 5 | 0.65 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 11 | 0.65 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 13 | 0.65 |
| (1,1109) | 1:A:26:ARG:HG3 | 1:A:27:MET:HA | 15 | 0.65 |
| (1,973) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:85:LEU:HD11 | 19 | 0.64 |
| (1,973) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:85:LEU:HD12 | 19 | 0.64 |
| (1,973) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:85:LEU:HD13 | 19 | 0.64 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 13 | 0.64 |
| (1,857) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:23:GLU:HB3 | 1 | 0.64 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 15 | 0.64 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 15 | 0.64 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 15 | 0.64 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 15 | 0.64 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 15 | 0.64 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 15 | 0.64 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 15 | 0.64 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 15 | 0.64 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 15 | 0.64 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HA | 10 | 0.64 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HA | 10 | 0.64 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HA | 10 | 0.64 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD11 | 1:A:74:LYS:HE2 | 2 | 0.64 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD12 | 1:A:74:LYS:HE2 | 2 | 0.64 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD13 | 1:A:74:LYS:HE2 | 2 | 0.64 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD11 | 1:A:74:LYS:HE2 | 12 | 0.64 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD12 | 1:A:74:LYS:HE2 | 12 | 0.64 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD13 | 1:A:74:LYS:HE2 | 12 | 0.64 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HD11 | 19 | 0.64 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HD12 | 19 | 0.64 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HD13 | 19 | 0.64 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HD11 | 19 | 0.64 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HD12 | 19 | 0.64 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HD13 | 19 | 0.64 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HD11 | 19 | 0.64 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HD12 | 19 | 0.64 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HD13 | 19 | 0.64 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 4 | 0.64 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 10 | 0.64 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 12 | 0.64 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 4 | 0.64 |
| (1,257) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 4 | 0.64 |
| (1,1714) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:HB2 | 12 | 0.64 |
| (1,1714) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:HB3 | 12 | 0.64 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB1 | 1:A:84:LYS:HD2 | 4 | 0.64 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB1 | 1:A:84:LYS:HD3 | 4 | 0.64 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB2 | 1:A:84:LYS:HD2 | 4 | 0.64 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB2 | 1:A:84:LYS:HD3 | 4 | 0.64 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB3 | 1:A:84:LYS:HD2 | 4 | 0.64 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB3 | 1:A:84:LYS:HD3 | 4 | 0.64 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB2 | 1:A:62:THR:H | 10 | 0.64 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB3 | 1:A:62:THR:H | 10 | 0.64 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:27:MET:H | 13 | 0.64 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:27:MET:H | 13 | 0.64 |
| (1,1236) | 1:A:50:GLU:HA | 1:A:52:CYS:H | 4 | 0.64 |
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 14 | 0.64 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 8 | 0.64 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 12 | 0.64 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 17 | 0.64 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 19 | 0.64 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 5 | 0.64 |
| (1,1109) | 1:A:26:ARG:HG3 | 1:A:27:MET:HA | 6 | 0.64 |
| (1,1109) | 1:A:26:ARG:HG3 | 1:A:27:MET:HA | 14 | 0.64 |
| (1,903) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:61:PRO:HB3 | 19 | 0.63 |
| (1,826) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HA | 4 | 0.63 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 1 | 0.63 |
| (1,328) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:49:ASN:HB2 | 4 | 0.63 |
| (1,325) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:H | 13 | 0.63 |
| (1,325) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:H | 18 | 0.63 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB2 | 1:A:62:THR:H | 9 | 0.63 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB3 | 1:A:62:THR:H | 9 | 0.63 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD21 | 8 | 0.63 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD22 | 8 | 0.63 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 13 | 0.63 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 13 | 0.63 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 13 | 0.63 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 13 | 0.63 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 13 | 0.63 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 13 | 0.63 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 13 | 0.63 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 13 | 0.63 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 13 | 0.63 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 13 | 0.63 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 13 | 0.63 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 13 | 0.63 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 13 | 0.63 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 13 | 0.63 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 13 | 0.63 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 13 | 0.63 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 13 | 0.63 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 13 | 0.63 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD11 | 18 | 0.63 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 18 | 0.63 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD13 | 18 | 0.63 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD21 | 18 | 0.63 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD22 | 18 | 0.63 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD23 | 18 | 0.63 |
| (1,1466) | 1:A:22:ILE:H | 1:A:23:GLU:HG2 | 2 | 0.63 |
| (1,1466) | 1:A:22:ILE:H | 1:A:23:GLU:HG3 | 2 | 0.63 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 3 | 0.63 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 20 | 0.63 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 16 | 0.62 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 16 | 0.62 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 16 | 0.62 |
| (1,941) | 1:A:23:GLU:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 8 | 0.62 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 12 | 0.62 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 16 | 0.62 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HA | 16 | 0.62 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HA | 16 | 0.62 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HA | 16 | 0.62 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HA | 11 | 0.62 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HA | 11 | 0.62 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HA | 11 | 0.62 |
| (1,257) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 11 | 0.62 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 6 | 0.62 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 11 | 0.62 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 19 | 0.62 |
| (1,174) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:26:ARG:HG3 | 12 | 0.62 |
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE2 | 1:A:81:ILE:H | 20 | 0.62 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE3 | 1:A:81:ILE:H | 20 | 0.62 |
| (1,1600) | 1:A:47:CYS:HA | 1:A:87:ASP:HB2 | 1 | 0.62 |
| (1,1600) | 1:A:47:CYS:HA | 1:A:87:ASP:HB3 | 1 | 0.62 |
| (1,1458) | 1:A:20:ASP:HB2 | 1:A:23:GLU:HB3 | 10 | 0.62 |
| (1,1458) | 1:A:20:ASP:HB3 | 1:A:23:GLU:HB3 | 10 | 0.62 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB2 | 15 | 0.62 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB3 | 15 | 0.62 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 15 | 0.62 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 18 | 0.62 |
| (1,1109) | 1:A:26:ARG:HG3 | 1:A:27:MET:HA | 18 | 0.62 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 17 | 0.61 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 17 | 0.61 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 17 | 0.61 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 18 | 0.61 |
| (1,827) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HG2 | 10 | 0.61 |
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 20 | 0.61 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HA | 18 | 0.61 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HA | 18 | 0.61 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HA | 18 | 0.61 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 16 | 0.61 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 1 | 0.61 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 13 | 0.61 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 3 | 0.61 |
| (1,475) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:69:ASN:HD22 | 13 | 0.61 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 4 | 0.61 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 15 | 0.61 |
| (1,189) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:H | 14 | 0.61 |
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE2 | 1:A:81:ILE:H | 9 | 0.61 |
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE3 | 1:A:81:ILE:H | 9 | 0.61 |
| (1,1619) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:60:CYS:HB2 | 6 | 0.61 |
| (1,1619) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:60:CYS:HB3 | 6 | 0.61 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 13 | 0.61 |
| (1,1143) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:78:LEU:HG | 7 | 0.61 |
| (1,973) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:85:LEU:HD11 | 6 | 0.6 |
| (1,973) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:85:LEU:HD12 | 6 | 0.6 |
| (1,973) | 1:A:38:ARG:HD3 | 1:A:85:LEU:HD13 | 6 | 0.6 |
| (1,956) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:47:CYS:HA | 1 | 0.6 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 18 | 0.6 |
| (1,857) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:23:GLU:HB3 | 13 | 0.6 |
| (1,815) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 17 | 0.6 |
| (1,815) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 17 | 0.6 |
| (1,815) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 17 | 0.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 15 | 0.6 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HA | 8 | 0.6 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HA | 8 | 0.6 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HA | 8 | 0.6 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 2 | 0.6 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 2 | 0.6 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 2 | 0.6 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 10 | 0.6 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 10 | 0.6 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 10 | 0.6 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 17 | 0.6 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 17 | 0.6 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 17 | 0.6 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD11 | 1:A:74:LYS:HE2 | 20 | 0.6 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD12 | 1:A:74:LYS:HE2 | 20 | 0.6 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD13 | 1:A:74:LYS:HE2 | 20 | 0.6 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 3 | 0.6 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 15 | 0.6 |
| (1,545) | 1:A:16:GLU:H | 1:A:18:GLN:H | 18 | 0.6 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 18 | 0.6 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 16 | 0.6 |
| (1,420) | 1:A:48:GLY:HA3 | 1:A:89:HIS:H | 18 | 0.6 |
| (1,325) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:H | 2 | 0.6 |
| (1,325) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:H | 5 | 0.6 |
| (1,174) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:26:ARG:HG3 | 2 | 0.6 |
| (1,174) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:26:ARG:HG3 | 11 | 0.6 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG2 | 7 | 0.6 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG3 | 7 | 0.6 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG2 | 7 | 0.6 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG3 | 7 | 0.6 |
| (1,1714) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:HB2 | 18 | 0.6 |
| (1,1714) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:HB3 | 18 | 0.6 |
| (1,1692) | 1:A:83:ALA:HA | 1:A:84:LYS:HD2 | 4 | 0.6 |
| (1,1692) | 1:A:83:ALA:HA | 1:A:84:LYS:HD3 | 4 | 0.6 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB2 | 1:A:62:THR:H | 12 | 0.6 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB3 | 1:A:62:THR:H | 12 | 0.6 |
| (1,1612) | 1:A:54:ASN:HA | 1:A:55:GLU:HG2 | 5 | 0.6 |
| (1,1612) | 1:A:54:ASN:HA | 1:A:55:GLU:HG3 | 5 | 0.6 |
| (1,1603) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HG2 | 4 | 0.6 |
| (1,1603) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HG3 | 4 | 0.6 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD21 | 13 | 0.6 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD22 | 13 | 0.6 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD11 | 5 | 0.6 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 5 | 0.6 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD13 | 5 | 0.6 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD21 | 5 | 0.6 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD22 | 5 | 0.6 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD23 | 5 | 0.6 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD11 | 8 | 0.6 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 8 | 0.6 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD13 | 8 | 0.6 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD21 | 8 | 0.6 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD22 | 8 | 0.6 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD23 | 8 | 0.6 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:27:MET:H | 5 | 0.6 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:27:MET:H | 5 | 0.6 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 6 | 0.6 |
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 6 | 0.6 |
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 9 | 0.6 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 8 | 0.6 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 4 | 0.6 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 5 | 0.6 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 16 | 0.6 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 19 | 0.6 |
| (1,1109) | 1:A:26:ARG:HG3 | 1:A:27:MET:HA | 1 | 0.6 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 14 | 0.59 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 14 | 0.59 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 14 | 0.59 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 20 | 0.59 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 20 | 0.59 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 20 | 0.59 |
| (1,941) | 1:A:23:GLU:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 3 | 0.59 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 2 | 0.59 |
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 13 | 0.59 |
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 14 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB1 | 12 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB2 | 12 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB3 | 12 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB1 | 12 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB2 | 12 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB3 | 12 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB1 | 12 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB2 | 12 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB3 | 12 | 0.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB1 | 14 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB2 | 14 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB3 | 14 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB1 | 14 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB2 | 14 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB3 | 14 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB1 | 14 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB2 | 14 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB3 | 14 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB1 | 20 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB2 | 20 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB3 | 20 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB1 | 20 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB2 | 20 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB3 | 20 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB1 | 20 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB2 | 20 | 0.59 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB3 | 20 | 0.59 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 17 | 0.59 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 17 | 0.59 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 17 | 0.59 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 7 | 0.59 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 7 | 0.59 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 7 | 0.59 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 5 | 0.59 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 5 | 0.59 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 5 | 0.59 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD11 | 17 | 0.59 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD12 | 17 | 0.59 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD13 | 17 | 0.59 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD11 | 3 | 0.59 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD12 | 3 | 0.59 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD13 | 3 | 0.59 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD11 | 3 | 0.59 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD12 | 3 | 0.59 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD13 | 3 | 0.59 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD11 | 3 | 0.59 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD12 | 3 | 0.59 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD13 | 3 | 0.59 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 8 | 0.59 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 18 | 0.59 |
| (1,420) | 1:A:48:GLY:HA3 | 1:A:89:HIS:H | 12 | 0.59 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 1 | 0.59 |
| (1,174) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:26:ARG:HG3 | 20 | 0.59 |
| (1,1617) | 1:A:56:PHE:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 11 | 0.59 |
| (1,1617) | 1:A:56:PHE:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 11 | 0.59 |
| (1,1617) | 1:A:56:PHE:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 11 | 0.59 |
| (1,1617) | 1:A:56:PHE:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 11 | 0.59 |
| (1,1617) | 1:A:56:PHE:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 11 | 0.59 |
| (1,1617) | 1:A:56:PHE:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 11 | 0.59 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD21 | 19 | 0.59 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD22 | 19 | 0.59 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB1 | 9 | 0.59 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB2 | 9 | 0.59 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB3 | 9 | 0.59 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB1 | 9 | 0.59 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB2 | 9 | 0.59 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB3 | 9 | 0.59 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 5 | 0.59 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 17 | 0.59 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 1 | 0.59 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 11 | 0.59 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 12 | 0.59 |
| (1,1276) | 1:A:43:LEU:H | 1:A:66:MET:HE1 | 17 | 0.59 |
| (1,1276) | 1:A:43:LEU:H | 1:A:66:MET:HE2 | 17 | 0.59 |
| (1,1276) | 1:A:43:LEU:H | 1:A:66:MET:HE3 | 17 | 0.59 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD11 | 7 | 0.59 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD12 | 7 | 0.59 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD13 | 7 | 0.59 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 1 | 0.59 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 7 | 0.59 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 15 | 0.59 |
| (1,1109) | 1:A:26:ARG:HG3 | 1:A:27:MET:HA | 17 | 0.59 |
| (1,978) | 1:A:86:CYS:HB2 | 1:A:87:ASP:HA | 6 | 0.58 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 10 | 0.58 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 10 | 0.58 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 10 | 0.58 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 12 | 0.58 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 12 | 0.58 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 12 | 0.58 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 5 | 0.58 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 15 | 0.58 |
| (1,835) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:82:ASN:HA | 4 | 0.58 |
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 6 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 7 | 0.58 |
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 8 | 0.58 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 19 | 0.58 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 19 | 0.58 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 19 | 0.58 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD11 | 1:A:74:LYS:HE2 | 5 | 0.58 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD12 | 1:A:74:LYS:HE2 | 5 | 0.58 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD13 | 1:A:74:LYS:HE2 | 5 | 0.58 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD11 | 1:A:74:LYS:HE2 | 11 | 0.58 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD12 | 1:A:74:LYS:HE2 | 11 | 0.58 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD13 | 1:A:74:LYS:HE2 | 11 | 0.58 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 17 | 0.58 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 17 | 0.58 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 17 | 0.58 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD11 | 5 | 0.58 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD12 | 5 | 0.58 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD13 | 5 | 0.58 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD11 | 5 | 0.58 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD12 | 5 | 0.58 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD13 | 5 | 0.58 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD11 | 5 | 0.58 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD12 | 5 | 0.58 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD13 | 5 | 0.58 |
| (1,554) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:H | 20 | 0.58 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 8 | 0.58 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 9 | 0.58 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 16 | 0.58 |
| (1,447) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:18:GLN:H | 10 | 0.58 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 8 | 0.58 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 11 | 0.58 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 14 | 0.58 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 18 | 0.58 |
| (1,152) | 1:A:26:ARG:HG2 | 1:A:27:MET:H | 14 | 0.58 |
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG2 | 1:A:7:LEU:H | 14 | 0.58 |
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG3 | 1:A:7:LEU:H | 14 | 0.58 |
| (1,1377) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:5:GLU:HG2 | 2 | 0.58 |
| (1,1377) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:5:GLU:HG3 | 2 | 0.58 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 15 | 0.58 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 18 | 0.58 |
| (1,1236) | 1:A:50:GLU:HA | 1:A:52:CYS:H | 9 | 0.58 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD11 | 20 | 0.58 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD12 | 20 | 0.58 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD13 | 20 | 0.58 |
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 7 | 0.58 |
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 20 | 0.58 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 9 | 0.58 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 9 | 0.58 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 9 | 0.58 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 17 | 0.58 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 6 | 0.58 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 12 | 0.58 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 17 | 0.58 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 17 | 0.58 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 17 | 0.58 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HE3 | 5 | 0.57 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HE3 | 5 | 0.57 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HE3 | 5 | 0.57 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HE3 | 15 | 0.57 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HE3 | 15 | 0.57 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HE3 | 15 | 0.57 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 1 | 0.57 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 8 | 0.57 |
| (1,941) | 1:A:23:GLU:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 19 | 0.57 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 8 | 0.57 |
| (1,903) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:61:PRO:HB3 | 4 | 0.57 |
| (1,827) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HG2 | 1 | 0.57 |
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 2 | 0.57 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB1 | 16 | 0.57 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB2 | 16 | 0.57 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB3 | 16 | 0.57 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB1 | 16 | 0.57 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB2 | 16 | 0.57 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB3 | 16 | 0.57 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB1 | 16 | 0.57 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB2 | 16 | 0.57 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB3 | 16 | 0.57 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 5 | 0.57 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 5 | 0.57 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 5 | 0.57 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD11 | 1:A:74:LYS:HE2 | 6 | 0.57 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD12 | 1:A:74:LYS:HE2 | 6 | 0.57 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD13 | 1:A:74:LYS:HE2 | 6 | 0.57 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD11 | 1:A:74:LYS:HE2 | 9 | 0.57 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD12 | 1:A:74:LYS:HE2 | 9 | 0.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD13 | 1:A:74:LYS:HE2 | 9 | 0.57 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD11 | 1:A:74:LYS:HE2 | 18 | 0.57 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD12 | 1:A:74:LYS:HE2 | 18 | 0.57 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD13 | 1:A:74:LYS:HE2 | 18 | 0.57 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 18 | 0.57 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 18 | 0.57 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 18 | 0.57 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 18 | 0.57 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 4 | 0.57 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 7 | 0.57 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 11 | 0.57 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 6 | 0.57 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 9 | 0.57 |
| (1,420) | 1:A:48:GLY:HA3 | 1:A:89:HIS:H | 1 | 0.57 |
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 5 | 0.57 |
| (1,285) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:86:CYS:HB3 | 1 | 0.57 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 17 | 0.57 |
| (1,214) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:63:PHE:H | 6 | 0.57 |
| (1,180) | 1:A:88:PRO:HB2 | 1:A:89:HIS:H | 5 | 0.57 |
| (1,174) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:26:ARG:HG3 | 16 | 0.57 |
| (1,1700) | 1:A:84:LYS:HD2 | 1:A:85:LEU:H | 4 | 0.57 |
| (1,1700) | 1:A:84:LYS:HD3 | 1:A:85:LEU:H | 4 | 0.57 |
| (1,1645) | 1:A:67:ASP:HB2 | 1:A:68:ASN:HA | 8 | 0.57 |
| (1,1645) | 1:A:67:ASP:HB3 | 1:A:68:ASN:HA | 8 | 0.57 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 16 | 0.57 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 16 | 0.57 |
| (1,1466) | 1:A:22:ILE:H | 1:A:23:GLU:HG2 | 15 | 0.57 |
| (1,1466) | 1:A:22:ILE:H | 1:A:23:GLU:HG3 | 15 | 0.57 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB2 | 2 | 0.57 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB3 | 2 | 0.57 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 4 | 0.57 |
| (1,1237) | 1:A:52:CYS:H | 1:A:53:THR:HG21 | 15 | 0.57 |
| (1,1237) | 1:A:52:CYS:H | 1:A:53:THR:HG22 | 15 | 0.57 |
| (1,1237) | 1:A:52:CYS:H | 1:A:53:THR:HG23 | 15 | 0.57 |
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 8 | 0.57 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 3 | 0.57 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 6 | 0.57 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 20 | 0.57 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 4 | 0.57 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 4 | 0.57 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 4 | 0.57 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 15 | 0.57 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 15 | 0.57 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 15 | 0.57 |
| (1,1163) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:79:TYR:HE2 | 14 | 0.57 |
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 12 | 0.57 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HE3 | 2 | 0.56 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HE3 | 2 | 0.56 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HE3 | 2 | 0.56 |
| (1,947) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HG3 | 18 | 0.56 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 5 | 0.56 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 17 | 0.56 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 17 | 0.56 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 17 | 0.56 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 17 | 0.56 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 17 | 0.56 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 17 | 0.56 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 17 | 0.56 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 17 | 0.56 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 17 | 0.56 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 8 | 0.56 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 8 | 0.56 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 8 | 0.56 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 8 | 0.56 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 8 | 0.56 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 8 | 0.56 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 8 | 0.56 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 8 | 0.56 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 8 | 0.56 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HA | 5 | 0.56 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HA | 5 | 0.56 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HA | 5 | 0.56 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 11 | 0.56 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 11 | 0.56 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 11 | 0.56 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 20 | 0.56 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 20 | 0.56 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 20 | 0.56 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 7 | 0.56 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 2 | 0.56 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 13 | 0.56 |
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 11 | 0.56 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 16 | 0.56 |
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 12 | 0.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,285) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:86:CYS:HB3 | 9 | 0.56 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 8 | 0.56 |
| (1,217) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:H | 12 | 0.56 |
| (1,1714) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:HB2 | 16 | 0.56 |
| (1,1714) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:HB3 | 16 | 0.56 |
| (1,152) | 1:A:26:ARG:HG2 | 1:A:27:MET:H | 1 | 0.56 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 19 | 0.56 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 19 | 0.56 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 19 | 0.56 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 19 | 0.56 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 19 | 0.56 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 19 | 0.56 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 19 | 0.56 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 19 | 0.56 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 19 | 0.56 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 19 | 0.56 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 19 | 0.56 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 19 | 0.56 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 19 | 0.56 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 19 | 0.56 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 19 | 0.56 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 19 | 0.56 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 19 | 0.56 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 19 | 0.56 |
| (1,1492) | 1:A:26:ARG:HD2 | 1:A:27:MET:HA | 11 | 0.56 |
| (1,1492) | 1:A:26:ARG:HD3 | 1:A:27:MET:HA | 11 | 0.56 |
| (1,1492) | 1:A:26:ARG:HD2 | 1:A:27:MET:HA | 20 | 0.56 |
| (1,1492) | 1:A:26:ARG:HD3 | 1:A:27:MET:HA | 20 | 0.56 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 9 | 0.56 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 11 | 0.56 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 18 | 0.56 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 20 | 0.56 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 15 | 0.56 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 15 | 0.56 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 15 | 0.56 |
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 10 | 0.56 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 10 | 0.56 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 16 | 0.56 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 2 | 0.56 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 3 | 0.56 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 9 | 0.56 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 14 | 0.56 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 20 | 0.56 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 8 | 0.55 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 8 | 0.55 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 8 | 0.55 |
| (1,827) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HG2 | 9 | 0.55 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE1 | 1:A:7:LEU:HG | 10 | 0.55 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE2 | 1:A:7:LEU:HG | 10 | 0.55 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE3 | 1:A:7:LEU:HG | 10 | 0.55 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB1 | 10 | 0.55 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB2 | 10 | 0.55 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB3 | 10 | 0.55 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB1 | 10 | 0.55 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB2 | 10 | 0.55 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB3 | 10 | 0.55 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB1 | 10 | 0.55 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB2 | 10 | 0.55 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB3 | 10 | 0.55 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 15 | 0.55 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 15 | 0.55 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 15 | 0.55 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD11 | 1:A:74:LYS:HE2 | 1 | 0.55 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD12 | 1:A:74:LYS:HE2 | 1 | 0.55 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD13 | 1:A:74:LYS:HE2 | 1 | 0.55 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD11 | 1:A:74:LYS:HE2 | 16 | 0.55 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD12 | 1:A:74:LYS:HE2 | 16 | 0.55 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD13 | 1:A:74:LYS:HE2 | 16 | 0.55 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 14 | 0.55 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 14 | 0.55 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 14 | 0.55 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD11 | 15 | 0.55 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD12 | 15 | 0.55 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD13 | 15 | 0.55 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 14 | 0.55 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 11 | 0.55 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 20 | 0.55 |
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 18 | 0.55 |
| (1,398) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:24:ALA:H | 8 | 0.55 |
| (1,325) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:H | 17 | 0.55 |
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 10 | 0.55 |
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 14 | 0.55 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 4 | 0.55 |
| (1,1645) | 1:A:67:ASP:HB2 | 1:A:68:ASN:HA | 1 | 0.55 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1645) | 1:A:67:ASP:HB3 | 1:A:68:ASN:HA | 1 | 0.55 |
| (1,1645) | 1:A:67:ASP:HB2 | 1:A:68:ASN:HA | 3 | 0.55 |
| (1,1645) | 1:A:67:ASP:HB3 | 1:A:68:ASN:HA | 3 | 0.55 |
| (1,1645) | 1:A:67:ASP:HB2 | 1:A:68:ASN:HA | 6 | 0.55 |
| (1,1645) | 1:A:67:ASP:HB3 | 1:A:68:ASN:HA | 6 | 0.55 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD21 | 12 | 0.55 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD22 | 12 | 0.55 |
| (1,1484) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HD2 | 10 | 0.55 |
| (1,1484) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HD3 | 10 | 0.55 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:27:MET:H | 16 | 0.55 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:27:MET:H | 16 | 0.55 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB1 | 20 | 0.55 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB2 | 20 | 0.55 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB3 | 20 | 0.55 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB1 | 20 | 0.55 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB2 | 20 | 0.55 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB3 | 20 | 0.55 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 9 | 0.55 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 15 | 0.55 |
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 2 | 0.55 |
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 3 | 0.55 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 3 | 0.55 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 3 | 0.55 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 3 | 0.55 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 6 | 0.55 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 6 | 0.55 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 6 | 0.55 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 7 | 0.55 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 7 | 0.55 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 7 | 0.55 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 18 | 0.55 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 18 | 0.55 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 18 | 0.55 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 20 | 0.55 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 20 | 0.55 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 20 | 0.55 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 16 | 0.55 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 19 | 0.55 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 4 | 0.55 |
| (1,1109) | 1:A:26:ARG:HG3 | 1:A:27:MET:HA | 4 | 0.55 |
| (1,978) | 1:A:86:CYS:HB2 | 1:A:87:ASP:HA | 11 | 0.54 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 15 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 15 | 0.54 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 15 | 0.54 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 13 | 0.54 |
| (1,903) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:61:PRO:HB3 | 12 | 0.54 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG21 | 15 | 0.54 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG22 | 15 | 0.54 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG23 | 15 | 0.54 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 4 | 0.54 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 4 | 0.54 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 4 | 0.54 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 4 | 0.54 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 4 | 0.54 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 4 | 0.54 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 4 | 0.54 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 4 | 0.54 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 4 | 0.54 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG21 | 9 | 0.54 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG22 | 9 | 0.54 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG23 | 9 | 0.54 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 4 | 0.54 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 4 | 0.54 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 4 | 0.54 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 4 | 0.54 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 4 | 0.54 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 4 | 0.54 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HD11 | 10 | 0.54 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HD12 | 10 | 0.54 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HD13 | 10 | 0.54 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HD11 | 10 | 0.54 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HD12 | 10 | 0.54 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HD13 | 10 | 0.54 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HD11 | 10 | 0.54 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HD12 | 10 | 0.54 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HD13 | 10 | 0.54 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 10 | 0.54 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 16 | 0.54 |
| (1,447) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:18:GLN:H | 14 | 0.54 |
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 16 | 0.54 |
| (1,214) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:63:PHE:H | 13 | 0.54 |
| (1,152) | 1:A:26:ARG:HG2 | 1:A:27:MET:H | 17 | 0.54 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 19 | 0.54 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 4 | 0.54 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 5 | 0.54 |
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 16 | 0.54 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 5 | 0.54 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 19 | 0.54 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 11 | 0.54 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 11 | 0.54 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 11 | 0.54 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 17 | 0.54 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 17 | 0.54 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 17 | 0.54 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 14 | 0.54 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 6 | 0.54 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 13 | 0.54 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:71:ALA:HA | 20 | 0.54 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:71:ALA:HA | 20 | 0.54 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:71:ALA:HA | 20 | 0.54 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 7 | 0.53 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 7 | 0.53 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 7 | 0.53 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 5 | 0.53 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 5 | 0.53 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 5 | 0.53 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 6 | 0.53 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 16 | 0.53 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 17 | 0.53 |
| (1,941) | 1:A:23:GLU:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 5 | 0.53 |
| (1,903) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:61:PRO:HB3 | 7 | 0.53 |
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 9 | 0.53 |
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 16 | 0.53 |
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 19 | 0.53 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 1 | 0.53 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 1 | 0.53 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 1 | 0.53 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 1 | 0.53 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 1 | 0.53 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 1 | 0.53 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 1 | 0.53 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 1 | 0.53 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 1 | 0.53 |
| (1,671) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 13 | 0.53 |
| (1,671) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 13 | 0.53 |
| (1,671) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 13 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD11 | 1:A:74:LYS:HE2 | 3 | 0.53 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD12 | 1:A:74:LYS:HE2 | 3 | 0.53 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD13 | 1:A:74:LYS:HE2 | 3 | 0.53 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 5 | 0.53 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 6 | 0.53 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 4 | 0.53 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 9 | 0.53 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 18 | 0.53 |
| (1,447) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:18:GLN:H | 2 | 0.53 |
| (1,444) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:H | 12 | 0.53 |
| (1,416) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:HA | 20 | 0.53 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 4 | 0.53 |
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 2 | 0.53 |
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 18 | 0.53 |
| (1,285) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:86:CYS:HB3 | 2 | 0.53 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 2 | 0.53 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 7 | 0.53 |
| (1,178) | 1:A:23:GLU:H | 1:A:26:ARG:HG3 | 16 | 0.53 |
| (1,1714) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:HB2 | 13 | 0.53 |
| (1,1714) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:HB3 | 13 | 0.53 |
| (1,1633) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:HG2 | 16 | 0.53 |
| (1,1633) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:HG2 | 16 | 0.53 |
| (1,1633) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:HG2 | 16 | 0.53 |
| (1,1633) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HG2 | 16 | 0.53 |
| (1,1633) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HG2 | 16 | 0.53 |
| (1,1633) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HG2 | 16 | 0.53 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD21 | 6 | 0.53 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD22 | 6 | 0.53 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 18 | 0.53 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 18 | 0.53 |
| (1,152) | 1:A:26:ARG:HG2 | 1:A:27:MET:H | 9 | 0.53 |
| (1,1460) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:23:GLU:HG2 | 15 | 0.53 |
| (1,1460) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:23:GLU:HG3 | 15 | 0.53 |
| (1,1387) | 1:A:6:LYS:HA | 1:A:6:LYS:HD2 | 8 | 0.53 |
| (1,1387) | 1:A:6:LYS:HA | 1:A:6:LYS:HD3 | 8 | 0.53 |
| (1,1377) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:5:GLU:HG2 | 20 | 0.53 |
| (1,1377) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:5:GLU:HG3 | 20 | 0.53 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 1 | 0.53 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 7 | 0.53 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 13 | 0.53 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 16 | 0.53 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 8 | 0.53 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 17 | 0.53 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 3 | 0.53 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 3 | 0.53 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 3 | 0.53 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 1 | 0.53 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 1 | 0.53 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 1 | 0.53 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 1 | 0.53 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 5 | 0.53 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 5 | 0.53 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 5 | 0.53 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 8 | 0.53 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 8 | 0.53 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 8 | 0.53 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 14 | 0.53 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 14 | 0.53 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 14 | 0.53 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 8 | 0.53 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 11 | 0.53 |
| (1,1163) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:79:TYR:HE2 | 18 | 0.53 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 13 | 0.53 |
| (1,1086) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:61:PRO:HD3 | 1 | 0.53 |
| (1,1015) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:78:LEU:HG | 1 | 0.53 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 2 | 0.52 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 14 | 0.52 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 14 | 0.52 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 14 | 0.52 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 14 | 0.52 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 14 | 0.52 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 14 | 0.52 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 14 | 0.52 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 14 | 0.52 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 14 | 0.52 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB1 | 8 | 0.52 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB2 | 8 | 0.52 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB3 | 8 | 0.52 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB1 | 8 | 0.52 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB2 | 8 | 0.52 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB3 | 8 | 0.52 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB1 | 8 | 0.52 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB2 | 8 | 0.52 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB3 | 8 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HA | 17 | 0.52 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HA | 17 | 0.52 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HA | 17 | 0.52 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG21 | 12 | 0.52 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG22 | 12 | 0.52 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG23 | 12 | 0.52 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 15 | 0.52 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 15 | 0.52 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 15 | 0.52 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 12 | 0.52 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 12 | 0.52 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 12 | 0.52 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 8 | 0.52 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 8 | 0.52 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 8 | 0.52 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD11 | 5 | 0.52 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD12 | 5 | 0.52 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD13 | 5 | 0.52 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 18 | 0.52 |
| (1,545) | 1:A:16:GLU:H | 1:A:18:GLN:H | 3 | 0.52 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 19 | 0.52 |
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 11 | 0.52 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 1 | 0.52 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 7 | 0.52 |
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 8 | 0.52 |
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 6 | 0.52 |
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 13 | 0.52 |
| (1,217) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:H | 9 | 0.52 |
| (1,1645) | 1:A:67:ASP:HB2 | 1:A:68:ASN:HA | 5 | 0.52 |
| (1,1645) | 1:A:67:ASP:HB3 | 1:A:68:ASN:HA | 5 | 0.52 |
| (1,1604) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HG2 | 4 | 0.52 |
| (1,1604) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HG3 | 4 | 0.52 |
| (1,1572) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 18 | 0.52 |
| (1,1572) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 18 | 0.52 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:27:MET:H | 4 | 0.52 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:27:MET:H | 4 | 0.52 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 2 | 0.52 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 2 | 0.52 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 5 | 0.52 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 17 | 0.52 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 16 | 0.52 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 16 | 0.52 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 16 | 0.52 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 19 | 0.52 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 19 | 0.52 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 19 | 0.52 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 10 | 0.52 |
| (1,1169) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:79:TYR:HE1 | 12 | 0.52 |
| (1,1151) | 1:A:11:TYR:HA | 1:A:11:TYR:HE1 | 18 | 0.52 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 2 | 0.52 |
| (1,1109) | 1:A:26:ARG:HG3 | 1:A:27:MET:HA | 8 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:78:LEU:HG | 7 | 0.52 |
| (1,1015) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:78:LEU:HG | 16 | 0.52 |
| (1,947) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HG3 | 5 | 0.51 |
| (1,941) | 1:A:23:GLU:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 13 | 0.51 |
| (1,933) | 1:A:53:THR:HG21 | 1:A:54:ASN:HB3 | 15 | 0.51 |
| (1,933) | 1:A:53:THR:HG22 | 1:A:54:ASN:HB3 | 15 | 0.51 |
| (1,933) | 1:A:53:THR:HG23 | 1:A:54:ASN:HB3 | 15 | 0.51 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 1 | 0.51 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 1 | 0.51 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 1 | 0.51 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB1 | 17 | 0.51 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB2 | 17 | 0.51 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB3 | 17 | 0.51 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB1 | 17 | 0.51 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB2 | 17 | 0.51 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB3 | 17 | 0.51 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB1 | 17 | 0.51 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB2 | 17 | 0.51 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB3 | 17 | 0.51 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 18 | 0.51 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 18 | 0.51 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 18 | 0.51 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD11 | 15 | 0.51 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD12 | 15 | 0.51 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD13 | 15 | 0.51 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HD11 | 17 | 0.51 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HD12 | 17 | 0.51 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HD13 | 17 | 0.51 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HD11 | 17 | 0.51 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HD12 | 17 | 0.51 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HD13 | 17 | 0.51 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HD11 | 17 | 0.51 |
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HD12 | 17 | 0.51 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,650) | 1:A:71:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HD13 | 17 | 0.51 |
| (1,565) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:51:ALA:H | 7 | 0.51 |
| (1,536) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:60:CYS:H | 6 | 0.51 |
| (1,494) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:57:CYS:H | 1 | 0.51 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 12 | 0.51 |
| (1,447) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:18:GLN:H | 7 | 0.51 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 8 | 0.51 |
| (1,444) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:H | 18 | 0.51 |
| (1,325) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:H | 10 | 0.51 |
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 1 | 0.51 |
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 11 | 0.51 |
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 19 | 0.51 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 5 | 0.51 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 19 | 0.51 |
| (1,239) | 1:A:61:PRO:HG2 | 1:A:63:PHE:H | 4 | 0.51 |
| (1,180) | 1:A:88:PRO:HB2 | 1:A:89:HIS:H | 1 | 0.51 |
| (1,152) | 1:A:26:ARG:HG2 | 1:A:27:MET:H | 8 | 0.51 |
| (1,1460) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:23:GLU:HG2 | 3 | 0.51 |
| (1,1460) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:23:GLU:HG3 | 3 | 0.51 |
| (1,1414) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:14:SER:HB2 | 15 | 0.51 |
| (1,1414) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:14:SER:HB3 | 15 | 0.51 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 6 | 0.51 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 10 | 0.51 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 12 | 0.51 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 2 | 0.51 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 9 | 0.51 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 3 | 0.51 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 10 | 0.51 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 14 | 0.51 |
| (1,1123) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:24:ALA:HA | 5 | 0.51 |
| (1,1109) | 1:A:26:ARG:HG3 | 1:A:27:MET:HA | 13 | 0.51 |
| (1,89) | 1:A:53:THR:HG21 | 1:A:54:ASN:HD21 | 15 | 0.5 |
| (1,89) | 1:A:53:THR:HG22 | 1:A:54:ASN:HD21 | 15 | 0.5 |
| (1,89) | 1:A:53:THR:HG23 | 1:A:54:ASN:HD21 | 15 | 0.5 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 17 | 0.5 |
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 11 | 0.5 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 6 | 0.5 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 6 | 0.5 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 6 | 0.5 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 6 | 0.5 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 6 | 0.5 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 6 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 6 | 0.5 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 6 | 0.5 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 6 | 0.5 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 7 | 0.5 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 7 | 0.5 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 7 | 0.5 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HA | 14 | 0.5 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HA | 14 | 0.5 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HA | 14 | 0.5 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 13 | 0.5 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 13 | 0.5 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 13 | 0.5 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 20 | 0.5 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 20 | 0.5 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 20 | 0.5 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD11 | 14 | 0.5 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD12 | 14 | 0.5 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD13 | 14 | 0.5 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 20 | 0.5 |
| (1,554) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:H | 6 | 0.5 |
| (1,545) | 1:A:16:GLU:H | 1:A:18:GLN:H | 7 | 0.5 |
| (1,526) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:69:ASN:HD21 | 13 | 0.5 |
| (1,504) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:12:TRP:HZ2 | 15 | 0.5 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 6 | 0.5 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 17 | 0.5 |
| (1,367) | 1:A:41:HIS:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 18 | 0.5 |
| (1,318) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:52:CYS:HB2 | 4 | 0.5 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 2 | 0.5 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 16 | 0.5 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 9 | 0.5 |
| (1,239) | 1:A:61:PRO:HG2 | 1:A:63:PHE:H | 16 | 0.5 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB1 | 1:A:84:LYS:HD2 | 9 | 0.5 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB1 | 1:A:84:LYS:HD3 | 9 | 0.5 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB2 | 1:A:84:LYS:HD2 | 9 | 0.5 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB2 | 1:A:84:LYS:HD3 | 9 | 0.5 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB3 | 1:A:84:LYS:HD2 | 9 | 0.5 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB3 | 1:A:84:LYS:HD3 | 9 | 0.5 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD21 | 18 | 0.5 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD22 | 18 | 0.5 |
| (1,152) | 1:A:26:ARG:HG2 | 1:A:27:MET:H | 15 | 0.5 |
| (1,1445) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HG12 | 19 | 0.5 |
| (1,1445) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HG13 | 19 | 0.5 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 14 | 0.5 |
| (1,1234) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:83:ALA:HA | 7 | 0.5 |
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 12 | 0.5 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 13 | 0.5 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 13 | 0.5 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 13 | 0.5 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 3 | 0.49 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 3 | 0.49 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 3 | 0.49 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HG2 | 13 | 0.49 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 13 | 0.49 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HG2 | 13 | 0.49 |
| (1,947) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HG3 | 7 | 0.49 |
| (1,941) | 1:A:23:GLU:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 14 | 0.49 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 7 | 0.49 |
| (1,827) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HG2 | 2 | 0.49 |
| (1,827) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HG2 | 18 | 0.49 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HA | 7 | 0.49 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HA | 7 | 0.49 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HA | 7 | 0.49 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HA | 18 | 0.49 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HA | 18 | 0.49 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HA | 18 | 0.49 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 6 | 0.49 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 6 | 0.49 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 6 | 0.49 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD3 | 14 | 0.49 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD3 | 14 | 0.49 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD3 | 14 | 0.49 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 10 | 0.49 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 10 | 0.49 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 10 | 0.49 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 7 | 0.49 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 13 | 0.49 |
| (1,554) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:H | 1 | 0.49 |
| (1,545) | 1:A:16:GLU:H | 1:A:18:GLN:H | 4 | 0.49 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 8 | 0.49 |
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 1 | 0.49 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 13 | 0.49 |
| (1,427) | 1:A:14:SER:HA | 1:A:15:GLY:H | 17 | 0.49 |
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 3 | 0.49 |
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 3 | 0.49 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 8 | 0.49 |
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 17 | 0.49 |
| (1,266) | 1:A:66:MET:HG2 | 1:A:71:ALA:H | 17 | 0.49 |
| (1,1682) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 1 | 0.49 |
| (1,1682) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 1 | 0.49 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 4 | 0.49 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 4 | 0.49 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 4 | 0.49 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 4 | 0.49 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 4 | 0.49 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 4 | 0.49 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 4 | 0.49 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 4 | 0.49 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 4 | 0.49 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 4 | 0.49 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 4 | 0.49 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 4 | 0.49 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 4 | 0.49 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 4 | 0.49 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 4 | 0.49 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 4 | 0.49 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 4 | 0.49 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 4 | 0.49 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 3 | 0.49 |
| (1,1272) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:H | 16 | 0.49 |
| (1,1272) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:H | 16 | 0.49 |
| (1,1272) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:H | 16 | 0.49 |
| (1,1250) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:68:ASN:HD21 | 3 | 0.49 |
| (1,1250) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:68:ASN:HD21 | 6 | 0.49 |
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 13 | 0.49 |
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 17 | 0.49 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 10 | 0.49 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 10 | 0.49 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 10 | 0.49 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 12 | 0.49 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 12 | 0.49 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 12 | 0.49 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 11 | 0.49 |
| (1,1015) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:78:LEU:HG | 19 | 0.49 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 11 | 0.48 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 11 | 0.48 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 11 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 20 | 0.48 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 3 | 0.48 |
| (1,894) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:27:MET:HB3 | 8 | 0.48 |
| (1,826) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HA | 13 | 0.48 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HA | 17 | 0.48 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HA | 17 | 0.48 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HA | 17 | 0.48 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HA | 19 | 0.48 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HA | 19 | 0.48 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HA | 19 | 0.48 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG21 | 20 | 0.48 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG22 | 20 | 0.48 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG23 | 20 | 0.48 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 5 | 0.48 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 5 | 0.48 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 5 | 0.48 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 3 | 0.48 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 3 | 0.48 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 3 | 0.48 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 3 | 0.48 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 3 | 0.48 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 3 | 0.48 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD11 | 14 | 0.48 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD12 | 14 | 0.48 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD13 | 14 | 0.48 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD11 | 14 | 0.48 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD12 | 14 | 0.48 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD13 | 14 | 0.48 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD11 | 14 | 0.48 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD12 | 14 | 0.48 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD13 | 14 | 0.48 |
| (1,536) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:60:CYS:H | 7 | 0.48 |
| (1,475) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:69:ASN:HD22 | 3 | 0.48 |
| (1,475) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:69:ASN:HD22 | 7 | 0.48 |
| (1,444) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:H | 14 | 0.48 |
| (1,417) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HA | 14 | 0.48 |
| (1,325) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:H | 11 | 0.48 |
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 15 | 0.48 |
| (1,257) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 20 | 0.48 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 12 | 0.48 |
| (1,180) | 1:A:88:PRO:HB2 | 1:A:89:HIS:H | 17 | 0.48 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 7 | 0.48 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 7 | 0.48 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 7 | 0.48 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 7 | 0.48 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 7 | 0.48 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 7 | 0.48 |
| (1,152) | 1:A:26:ARG:HG2 | 1:A:27:MET:H | 4 | 0.48 |
| (1,1360) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:H | 8 | 0.48 |
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 11 | 0.48 |
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 18 | 0.48 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 7 | 0.48 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 14 | 0.48 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 18 | 0.48 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 2 | 0.48 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 4 | 0.47 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 4 | 0.47 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 4 | 0.47 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 7 | 0.47 |
| (1,894) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:27:MET:HB3 | 2 | 0.47 |
| (1,857) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:23:GLU:HB3 | 11 | 0.47 |
| (1,826) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HA | 1 | 0.47 |
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 12 | 0.47 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 8 | 0.47 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 8 | 0.47 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 8 | 0.47 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 20 | 0.47 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 20 | 0.47 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 20 | 0.47 |
| (1,677) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 16 | 0.47 |
| (1,677) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 16 | 0.47 |
| (1,677) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 16 | 0.47 |
| (1,677) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 20 | 0.47 |
| (1,677) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 20 | 0.47 |
| (1,677) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 20 | 0.47 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 5 | 0.47 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 5 | 0.47 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 5 | 0.47 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 6 | 0.47 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 6 | 0.47 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 6 | 0.47 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 8 | 0.47 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 8 | 0.47 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 8 | 0.47 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 9 | 0.47 |
| (1,526) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:69:ASN:HD21 | 7 | 0.47 |
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 4 | 0.47 |
| (1,416) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:HA | 16 | 0.47 |
| (1,310) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:75:ALA:H | 8 | 0.47 |
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 4 | 0.47 |
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 7 | 0.47 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 3 | 0.47 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 15 | 0.47 |
| (1,210) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 6 | 0.47 |
| (1,210) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 10 | 0.47 |
| (1,210) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 17 | 0.47 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB2 | 1:A:62:THR:H | 8 | 0.47 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB3 | 1:A:62:THR:H | 8 | 0.47 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB2 | 11 | 0.47 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB3 | 11 | 0.47 |
| (1,1394) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:8:HIS:HB2 | 17 | 0.47 |
| (1,1394) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:8:HIS:HB3 | 17 | 0.47 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 2 | 0.47 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 2 | 0.47 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 2 | 0.47 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 11 | 0.47 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 1 | 0.47 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 12 | 0.47 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 8 | 0.47 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 17 | 0.47 |
| (1,1124) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:22:ILE:HB | 9 | 0.47 |
| (1,1015) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:78:LEU:HG | 12 | 0.47 |
| (1,1011) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 7 | 0.47 |
| (1,992) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:68:ASN:HB3 | 14 | 0.46 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 13 | 0.46 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 13 | 0.46 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 13 | 0.46 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 19 | 0.46 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:46:GLY:H | 15 | 0.46 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:46:GLY:H | 15 | 0.46 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:46:GLY:H | 15 | 0.46 |
| (1,815) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 2 | 0.46 |
| (1,815) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 2 | 0.46 |
| (1,815) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 2 | 0.46 |
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 4 | 0.46 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 14 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 14 | 0.46 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 14 | 0.46 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG21 | 19 | 0.46 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG22 | 19 | 0.46 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG23 | 19 | 0.46 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 8 | 0.46 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 8 | 0.46 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 8 | 0.46 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 15 | 0.46 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 15 | 0.46 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 15 | 0.46 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 16 | 0.46 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 16 | 0.46 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 16 | 0.46 |
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 5 | 0.46 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD3 | 19 | 0.46 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD3 | 19 | 0.46 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD3 | 19 | 0.46 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 16 | 0.46 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 16 | 0.46 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 16 | 0.46 |
| (1,554) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:H | 10 | 0.46 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 10 | 0.46 |
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 9 | 0.46 |
| (1,257) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 16 | 0.46 |
| (1,225) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:H | 2 | 0.46 |
| (1,214) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:63:PHE:H | 7 | 0.46 |
| (1,210) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 14 | 0.46 |
| (1,1695) | 1:A:83:ALA:HB1 | 1:A:84:LYS:HE2 | 2 | 0.46 |
| (1,1695) | 1:A:83:ALA:HB1 | 1:A:84:LYS:HE3 | 2 | 0.46 |
| (1,1695) | 1:A:83:ALA:HB2 | 1:A:84:LYS:HE2 | 2 | 0.46 |
| (1,1695) | 1:A:83:ALA:HB2 | 1:A:84:LYS:HE3 | 2 | 0.46 |
| (1,1695) | 1:A:83:ALA:HB3 | 1:A:84:LYS:HE2 | 2 | 0.46 |
| (1,1695) | 1:A:83:ALA:HB3 | 1:A:84:LYS:HE3 | 2 | 0.46 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB2 | 1:A:62:THR:H | 17 | 0.46 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB3 | 1:A:62:THR:H | 17 | 0.46 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:27:MET:H | 20 | 0.46 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:27:MET:H | 20 | 0.46 |
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG2 | 1:A:7:LEU:H | 7 | 0.46 |
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG3 | 1:A:7:LEU:H | 7 | 0.46 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 13 | 0.46 |
| (1,1250) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:68:ASN:HD21 | 17 | 0.46 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 4 | 0.46 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HD1 | 15 | 0.46 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HD1 | 15 | 0.46 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HD1 | 15 | 0.46 |
| (1,1155) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:HA | 10 | 0.46 |
| (1,1151) | 1:A:11:TYR:HA | 1:A:11:TYR:HE1 | 9 | 0.46 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 15 | 0.46 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 5 | 0.45 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 5 | 0.45 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 5 | 0.45 |
| (1,903) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:61:PRO:HB3 | 10 | 0.45 |
| (1,903) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:61:PRO:HB3 | 13 | 0.45 |
| (1,841) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HB2 | 12 | 0.45 |
| (1,824) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HB3 | 4 | 0.45 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB1 | 5 | 0.45 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB2 | 5 | 0.45 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB3 | 5 | 0.45 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB1 | 5 | 0.45 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB2 | 5 | 0.45 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB3 | 5 | 0.45 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB1 | 5 | 0.45 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB2 | 5 | 0.45 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB3 | 5 | 0.45 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 7 | 0.45 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 7 | 0.45 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 7 | 0.45 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 2 | 0.45 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 2 | 0.45 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 2 | 0.45 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 6 | 0.45 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 6 | 0.45 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 6 | 0.45 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:HA | 1 | 0.45 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:HA | 1 | 0.45 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:HA | 1 | 0.45 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD11 | 5 | 0.45 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD12 | 5 | 0.45 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD13 | 5 | 0.45 |
| (1,564) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:49:ASN:H | 7 | 0.45 |
| (1,475) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:69:ASN:HD22 | 20 | 0.45 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 2 | 0.45 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 14 | 0.45 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 10 | 0.45 |
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 13 | 0.45 |
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 14 | 0.45 |
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 20 | 0.45 |
| (1,416) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:HA | 2 | 0.45 |
| (1,416) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:HA | 5 | 0.45 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 13 | 0.45 |
| (1,210) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 11 | 0.45 |
| (1,210) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 18 | 0.45 |
| (1,180) | 1:A:88:PRO:HB2 | 1:A:89:HIS:H | 7 | 0.45 |
| (1,1708) | 1:A:86:CYS:H | 1:A:87:ASP:HB2 | 6 | 0.45 |
| (1,1708) | 1:A:86:CYS:H | 1:A:87:ASP:HB3 | 6 | 0.45 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB1 | 5 | 0.45 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB2 | 5 | 0.45 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB3 | 5 | 0.45 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB1 | 5 | 0.45 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB2 | 5 | 0.45 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB3 | 5 | 0.45 |
| (1,1423) | 1:A:14:SER:HB2 | 1:A:16:GLU:HG2 | 8 | 0.45 |
| (1,1423) | 1:A:14:SER:HB2 | 1:A:16:GLU:HG3 | 8 | 0.45 |
| (1,1423) | 1:A:14:SER:HB3 | 1:A:16:GLU:HG2 | 8 | 0.45 |
| (1,1423) | 1:A:14:SER:HB3 | 1:A:16:GLU:HG3 | 8 | 0.45 |
| (1,1414) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:14:SER:HB2 | 1 | 0.45 |
| (1,1414) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:14:SER:HB3 | 1 | 0.45 |
| (1,1413) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HE2 | 15 | 0.45 |
| (1,1413) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HE3 | 15 | 0.45 |
| (1,1340) | 1:A:84:LYS:HG3 | 1:A:85:LEU:H | 11 | 0.45 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 14 | 0.45 |
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 19 | 0.45 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 18 | 0.45 |
| (1,1142) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:39:TYR:HE2 | 17 | 0.45 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 1 | 0.45 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 8 | 0.45 |
| (1,1011) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 20 | 0.45 |
| (1,941) | 1:A:23:GLU:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 6 | 0.44 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 12 | 0.44 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 12 | 0.44 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 12 | 0.44 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 12 | 0.44 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 12 | 0.44 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 12 | 0.44 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 12 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 12 | 0.44 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 12 | 0.44 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 2 | 0.44 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 2 | 0.44 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 2 | 0.44 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB1 | 3 | 0.44 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB2 | 3 | 0.44 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB3 | 3 | 0.44 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB1 | 3 | 0.44 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB2 | 3 | 0.44 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB3 | 3 | 0.44 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB1 | 3 | 0.44 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB2 | 3 | 0.44 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB3 | 3 | 0.44 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HA | 15 | 0.44 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HA | 15 | 0.44 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HA | 15 | 0.44 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG21 | 3 | 0.44 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG22 | 3 | 0.44 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG23 | 3 | 0.44 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG21 | 10 | 0.44 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG22 | 10 | 0.44 |
| (1,704) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:HG23 | 10 | 0.44 |
| (1,677) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 19 | 0.44 |
| (1,677) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 19 | 0.44 |
| (1,677) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 19 | 0.44 |
| (1,671) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 17 | 0.44 |
| (1,671) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 17 | 0.44 |
| (1,671) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 17 | 0.44 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 19 | 0.44 |
| (1,545) | 1:A:16:GLU:H | 1:A:18:GLN:H | 10 | 0.44 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 3 | 0.44 |
| (1,454) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:H | 1 | 0.44 |
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 1 | 0.44 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 10 | 0.44 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 14 | 0.44 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 15 | 0.44 |
| (1,427) | 1:A:14:SER:HA | 1:A:15:GLY:H | 6 | 0.44 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 11 | 0.44 |
| (1,239) | 1:A:61:PRO:HG2 | 1:A:63:PHE:H | 3 | 0.44 |
| (1,225) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:H | 4 | 0.44 |
| (1,225) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:H | 8 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,210) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 1 | 0.44 |
| (1,210) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 4 | 0.44 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 1 | 0.44 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 1 | 0.44 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 1 | 0.44 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 1 | 0.44 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 1 | 0.44 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 1 | 0.44 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 6 | 0.44 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 6 | 0.44 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 6 | 0.44 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 6 | 0.44 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 6 | 0.44 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 6 | 0.44 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 6 | 0.44 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 6 | 0.44 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 6 | 0.44 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 6 | 0.44 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 6 | 0.44 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 6 | 0.44 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 6 | 0.44 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 6 | 0.44 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 6 | 0.44 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 6 | 0.44 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 6 | 0.44 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 6 | 0.44 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD2 | 19 | 0.44 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD3 | 19 | 0.44 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD2 | 19 | 0.44 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD3 | 19 | 0.44 |
| (1,1476) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:25:SER:H | 8 | 0.44 |
| (1,1476) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:25:SER:H | 8 | 0.44 |
| (1,1401) | 1:A:10:CYS:HB2 | 1:A:11:TYR:H | 19 | 0.44 |
| (1,1401) | 1:A:10:CYS:HB3 | 1:A:11:TYR:H | 19 | 0.44 |
| (1,1236) | 1:A:50:GLU:HA | 1:A:52:CYS:H | 10 | 0.44 |
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 1 | 0.44 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 7 | 0.44 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 18 | 0.44 |
| (1,1086) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:61:PRO:HD3 | 16 | 0.44 |
| (1,1081) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HA | 5 | 0.44 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 4 | 0.44 |
| (1,1015) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:78:LEU:HG | 8 | 0.44 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HE3 | 10 | 0.43 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HE3 | 10 | 0.43 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HE3 | 10 | 0.43 |
| (1,945) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:88:PRO:HD3 | 13 | 0.43 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 12 | 0.43 |
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 10 | 0.43 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 13 | 0.43 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 13 | 0.43 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 13 | 0.43 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 13 | 0.43 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 13 | 0.43 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 13 | 0.43 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 13 | 0.43 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 13 | 0.43 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 13 | 0.43 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 15 | 0.43 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 15 | 0.43 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 15 | 0.43 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HA | 13 | 0.43 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HA | 13 | 0.43 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HA | 13 | 0.43 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HA | 3 | 0.43 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HA | 3 | 0.43 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HA | 3 | 0.43 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HA | 8 | 0.43 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HA | 8 | 0.43 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HA | 8 | 0.43 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 9 | 0.43 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 9 | 0.43 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 9 | 0.43 |
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 15 | 0.43 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD11 | 12 | 0.43 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD12 | 12 | 0.43 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD13 | 12 | 0.43 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD11 | 1:A:74:LYS:HE2 | 14 | 0.43 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD12 | 1:A:74:LYS:HE2 | 14 | 0.43 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD13 | 1:A:74:LYS:HE2 | 14 | 0.43 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD11 | 1:A:74:LYS:HE2 | 15 | 0.43 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD12 | 1:A:74:LYS:HE2 | 15 | 0.43 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD13 | 1:A:74:LYS:HE2 | 15 | 0.43 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 4 | 0.43 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 4 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 4 | 0.43 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD11 | 3 | 0.43 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD12 | 3 | 0.43 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD13 | 3 | 0.43 |
| (1,554) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:H | 2 | 0.43 |
| (1,526) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:69:ASN:HD21 | 3 | 0.43 |
| (1,526) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:69:ASN:HD21 | 17 | 0.43 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 19 | 0.43 |
| (1,416) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:HA | 8 | 0.43 |
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 9 | 0.43 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 7 | 0.43 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 20 | 0.43 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:H | 2 | 0.43 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:H | 2 | 0.43 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:H | 2 | 0.43 |
| (1,225) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:H | 12 | 0.43 |
| (1,220) | 1:A:25:SER:H | 1:A:27:MET:HE1 | 3 | 0.43 |
| (1,220) | 1:A:25:SER:H | 1:A:27:MET:HE2 | 3 | 0.43 |
| (1,220) | 1:A:25:SER:H | 1:A:27:MET:HE3 | 3 | 0.43 |
| (1,214) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:63:PHE:H | 5 | 0.43 |
| (1,214) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:63:PHE:H | 18 | 0.43 |
| (1,210) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 9 | 0.43 |
| (1,210) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 13 | 0.43 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG2 | 17 | 0.43 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG3 | 17 | 0.43 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG2 | 17 | 0.43 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG3 | 17 | 0.43 |
| (1,1708) | 1:A:86:CYS:H | 1:A:87:ASP:HB2 | 19 | 0.43 |
| (1,1708) | 1:A:86:CYS:H | 1:A:87:ASP:HB3 | 19 | 0.43 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB2 | 1:A:62:THR:H | 2 | 0.43 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB3 | 1:A:62:THR:H | 2 | 0.43 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB2 | 1:A:62:THR:H | 15 | 0.43 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB3 | 1:A:62:THR:H | 15 | 0.43 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD21 | 16 | 0.43 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD22 | 16 | 0.43 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 13 | 0.43 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 13 | 0.43 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 20 | 0.43 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 20 | 0.43 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB1 | 10 | 0.43 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB2 | 10 | 0.43 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB3 | 10 | 0.43 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB1 | 10 | 0.43 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB2 | 10 | 0.43 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB3 | 10 | 0.43 |
| (1,1418) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:14:SER:H | 2 | 0.43 |
| (1,1418) | 1:A:13:LYS:HG3 | 1:A:14:SER:H | 2 | 0.43 |
| (1,1408) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HE2 | 4 | 0.43 |
| (1,1408) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HE3 | 4 | 0.43 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB2 | 1 | 0.43 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB3 | 1 | 0.43 |
| (1,1401) | 1:A:10:CYS:HB2 | 1:A:11:TYR:H | 8 | 0.43 |
| (1,1401) | 1:A:10:CYS:HB3 | 1:A:11:TYR:H | 8 | 0.43 |
| (1,1342) | 1:A:54:ASN:HD22 | 1:A:84:LYS:HG2 | 6 | 0.43 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD11 | 17 | 0.43 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD12 | 17 | 0.43 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD13 | 17 | 0.43 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 6 | 0.43 |
| (1,1163) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:79:TYR:HE2 | 19 | 0.43 |
| (1,1055) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:66:MET:HG3 | 11 | 0.43 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 2 | 0.43 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HG2 | 16 | 0.42 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 16 | 0.42 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HG2 | 16 | 0.42 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 14 | 0.42 |
| (1,913) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HD3 | 11 | 0.42 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:46:GLY:H | 16 | 0.42 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:46:GLY:H | 16 | 0.42 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:46:GLY:H | 16 | 0.42 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:46:GLY:H | 20 | 0.42 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:46:GLY:H | 20 | 0.42 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:46:GLY:H | 20 | 0.42 |
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 17 | 0.42 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 3 | 0.42 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 3 | 0.42 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 3 | 0.42 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 16 | 0.42 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 16 | 0.42 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 16 | 0.42 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB1 | 11 | 0.42 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB2 | 11 | 0.42 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB3 | 11 | 0.42 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB1 | 11 | 0.42 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB2 | 11 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB3 | 11 | 0.42 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB1 | 11 | 0.42 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB2 | 11 | 0.42 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB3 | 11 | 0.42 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG21 | 4 | 0.42 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG22 | 4 | 0.42 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG23 | 4 | 0.42 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 4 | 0.42 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 4 | 0.42 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 4 | 0.42 |
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 2 | 0.42 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD3 | 17 | 0.42 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD3 | 17 | 0.42 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD3 | 17 | 0.42 |
| (1,674) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD11 | 20 | 0.42 |
| (1,674) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD12 | 20 | 0.42 |
| (1,674) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD13 | 20 | 0.42 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 12 | 0.42 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 12 | 0.42 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 12 | 0.42 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 13 | 0.42 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 13 | 0.42 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 13 | 0.42 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 15 | 0.42 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 15 | 0.42 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 15 | 0.42 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 20 | 0.42 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 20 | 0.42 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 20 | 0.42 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD11 | 14 | 0.42 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD12 | 14 | 0.42 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD13 | 14 | 0.42 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 1 | 0.42 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 1 | 0.42 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 1 | 0.42 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 17 | 0.42 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 17 | 0.42 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 17 | 0.42 |
| (1,554) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:H | 7 | 0.42 |
| (1,554) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:H | 8 | 0.42 |
| (1,475) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:69:ASN:HD22 | 17 | 0.42 |
| (1,463) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:79:TYR:H | 5 | 0.42 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 15 | 0.42 |
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 16 | 0.42 |
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 7 | 0.42 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 2 | 0.42 |
| (1,405) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:65:ARG:HA | 9 | 0.42 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 6 | 0.42 |
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 4 | 0.42 |
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 17 | 0.42 |
| (1,217) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:H | 10 | 0.42 |
| (1,217) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:H | 19 | 0.42 |
| (1,210) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 8 | 0.42 |
| (1,210) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 15 | 0.42 |
| (1,210) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 16 | 0.42 |
| (1,1621) | 1:A:59:SER:HB2 | 1:A:60:CYS:HA | 1 | 0.42 |
| (1,1621) | 1:A:59:SER:HB3 | 1:A:60:CYS:HA | 1 | 0.42 |
| (1,1604) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HG2 | 7 | 0.42 |
| (1,1604) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HG3 | 7 | 0.42 |
| (1,152) | 1:A:26:ARG:HG2 | 1:A:27:MET:H | 13 | 0.42 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD11 | 20 | 0.42 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD12 | 20 | 0.42 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD13 | 20 | 0.42 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD11 | 20 | 0.42 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD12 | 20 | 0.42 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD13 | 20 | 0.42 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 12 | 0.42 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 12 | 0.42 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 12 | 0.42 |
| (1,1236) | 1:A:50:GLU:HA | 1:A:52:CYS:H | 13 | 0.42 |
| (1,1163) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:79:TYR:HE2 | 6 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:78:LEU:HG | 6 | 0.42 |
| (1,1015) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:78:LEU:HG | 20 | 0.42 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 8 | 0.41 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 8 | 0.41 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 8 | 0.41 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 10 | 0.41 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 10 | 0.41 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 10 | 0.41 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 13 | 0.41 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 13 | 0.41 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 13 | 0.41 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HE3 | 3 | 0.41 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HE3 | 3 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HE3 | 3 | 0.41 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HE3 | 16 | 0.41 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HE3 | 16 | 0.41 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HE3 | 16 | 0.41 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB1 | 10 | 0.41 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB2 | 10 | 0.41 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB3 | 10 | 0.41 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB1 | 17 | 0.41 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB2 | 17 | 0.41 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB3 | 17 | 0.41 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 12 | 0.41 |
| (1,827) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HG2 | 14 | 0.41 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE1 | 1:A:7:LEU:HG | 9 | 0.41 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE2 | 1:A:7:LEU:HG | 9 | 0.41 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE3 | 1:A:7:LEU:HG | 9 | 0.41 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB1 | 1 | 0.41 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB2 | 1 | 0.41 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB3 | 1 | 0.41 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 9 | 0.41 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 9 | 0.41 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 9 | 0.41 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG21 | 6 | 0.41 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG22 | 6 | 0.41 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG23 | 6 | 0.41 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 19 | 0.41 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 19 | 0.41 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 19 | 0.41 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD3 | 10 | 0.41 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD3 | 10 | 0.41 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD3 | 10 | 0.41 |
| (1,655) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 20 | 0.41 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD11 | 7 | 0.41 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD12 | 7 | 0.41 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD13 | 7 | 0.41 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD11 | 19 | 0.41 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD12 | 19 | 0.41 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD13 | 19 | 0.41 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 16 | 0.41 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 16 | 0.41 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 16 | 0.41 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 17 | 0.41 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 17 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 17 | 0.41 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 14 | 0.41 |
| (1,554) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:H | 16 | 0.41 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 3 | 0.41 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 1 | 0.41 |
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 6 | 0.41 |
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 17 | 0.41 |
| (1,426) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:60:CYS:H | 7 | 0.41 |
| (1,416) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:HA | 3 | 0.41 |
| (1,302) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:77:GLU:H | 20 | 0.41 |
| (1,183) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HB2 | 18 | 0.41 |
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE2 | 1:A:81:ILE:H | 14 | 0.41 |
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE3 | 1:A:81:ILE:H | 14 | 0.41 |
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE2 | 1:A:81:ILE:H | 15 | 0.41 |
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE3 | 1:A:81:ILE:H | 15 | 0.41 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:66:MET:H | 6 | 0.41 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:MET:H | 6 | 0.41 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB2 | 1:A:62:THR:H | 18 | 0.41 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB3 | 1:A:62:THR:H | 18 | 0.41 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB2 | 1:A:62:THR:H | 19 | 0.41 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB3 | 1:A:62:THR:H | 19 | 0.41 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 7 | 0.41 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 7 | 0.41 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 12 | 0.41 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 12 | 0.41 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 12 | 0.41 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 12 | 0.41 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 12 | 0.41 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 12 | 0.41 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 12 | 0.41 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 12 | 0.41 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 12 | 0.41 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 12 | 0.41 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 12 | 0.41 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 12 | 0.41 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 12 | 0.41 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 12 | 0.41 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 12 | 0.41 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 12 | 0.41 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 12 | 0.41 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 12 | 0.41 |
| (1,1476) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:25:SER:H | 2 | 0.41 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1476) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:25:SER:H | 2 | 0.41 |
| (1,1413) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HE2 | 12 | 0.41 |
| (1,1413) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HE3 | 12 | 0.41 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 17 | 0.41 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 17 | 0.41 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 17 | 0.41 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 20 | 0.41 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 20 | 0.41 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 20 | 0.41 |
| (1,1286) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:H | 13 | 0.41 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD11 | 16 | 0.41 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD12 | 16 | 0.41 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD13 | 16 | 0.41 |
| (1,1151) | 1:A:11:TYR:HA | 1:A:11:TYR:HE1 | 3 | 0.41 |
| (1,1151) | 1:A:11:TYR:HA | 1:A:11:TYR:HE1 | 8 | 0.41 |
| (1,1123) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:24:ALA:HA | 18 | 0.41 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 11 | 0.41 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 11 | 0.41 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 11 | 0.41 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 16 | 0.41 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:75:ALA:HA | 20 | 0.41 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:75:ALA:HA | 20 | 0.41 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:75:ALA:HA | 20 | 0.41 |
| (1,1015) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:78:LEU:HG | 13 | 0.41 |
| (1,1011) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 11 | 0.41 |
| (1,1008) | 1:A:34:HIS:HB3 | 1:A:35:LEU:HA | 13 | 0.41 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB1 | 15 | 0.4 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB2 | 15 | 0.4 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB3 | 15 | 0.4 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HE3 | 17 | 0.4 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HE3 | 17 | 0.4 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HE3 | 17 | 0.4 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 6 | 0.4 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 6 | 0.4 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 6 | 0.4 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 18 | 0.4 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 18 | 0.4 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 18 | 0.4 |
| (1,947) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HG3 | 14 | 0.4 |
| (1,865) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HB2 | 14 | 0.4 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 8 | 0.4 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 8 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 8 | 0.4 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 12 | 0.4 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 12 | 0.4 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 12 | 0.4 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 10 | 0.4 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 10 | 0.4 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 10 | 0.4 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG21 | 11 | 0.4 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG22 | 11 | 0.4 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG23 | 11 | 0.4 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 18 | 0.4 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 18 | 0.4 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 18 | 0.4 |
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 1 | 0.4 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 13 | 0.4 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 13 | 0.4 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 13 | 0.4 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:HA | 2 | 0.4 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:HA | 2 | 0.4 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:HA | 2 | 0.4 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 2 | 0.4 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 2 | 0.4 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 2 | 0.4 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 1 | 0.4 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 1 | 0.4 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 1 | 0.4 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 20 | 0.4 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 20 | 0.4 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 20 | 0.4 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:25:SER:H | 20 | 0.4 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:25:SER:H | 20 | 0.4 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:25:SER:H | 20 | 0.4 |
| (1,417) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HA | 4 | 0.4 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 12 | 0.4 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 1 | 0.4 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 15 | 0.4 |
| (1,225) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:H | 20 | 0.4 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 2 | 0.4 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 2 | 0.4 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 2 | 0.4 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 2 | 0.4 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 2 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 2 | 0.4 |
| (1,1612) | 1:A:54:ASN:HA | 1:A:55:GLU:HG2 | 20 | 0.4 |
| (1,1612) | 1:A:54:ASN:HA | 1:A:55:GLU:HG3 | 20 | 0.4 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 1 | 0.4 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 1 | 0.4 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 1 | 0.4 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 1 | 0.4 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 1 | 0.4 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 1 | 0.4 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 1 | 0.4 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 1 | 0.4 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 1 | 0.4 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 1 | 0.4 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 1 | 0.4 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 1 | 0.4 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 1 | 0.4 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 1 | 0.4 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 1 | 0.4 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 1 | 0.4 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 1 | 0.4 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 1 | 0.4 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD11 | 6 | 0.4 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 6 | 0.4 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD13 | 6 | 0.4 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD21 | 6 | 0.4 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD22 | 6 | 0.4 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD23 | 6 | 0.4 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD11 | 14 | 0.4 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 14 | 0.4 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD13 | 14 | 0.4 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD21 | 14 | 0.4 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD22 | 14 | 0.4 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD23 | 14 | 0.4 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD11 | 15 | 0.4 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 15 | 0.4 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD13 | 15 | 0.4 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD21 | 15 | 0.4 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD22 | 15 | 0.4 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD23 | 15 | 0.4 |
| (1,1438) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:18:GLN:HE21 | 17 | 0.4 |
| (1,1438) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:18:GLN:HE22 | 17 | 0.4 |
| (1,1340) | 1:A:84:LYS:HG3 | 1:A:85:LEU:H | 1 | 0.4 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HD1 | 5 | 0.4 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HD1 | 5 | 0.4 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HD1 | 5 | 0.4 |
| (1,1151) | 1:A:11:TYR:HA | 1:A:11:TYR:HE1 | 16 | 0.4 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 11 | 0.4 |
| (1,1081) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HA | 18 | 0.4 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 3 | 0.4 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 18 | 0.4 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HE3 | 20 | 0.39 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HE3 | 20 | 0.39 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HE3 | 20 | 0.39 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 2 | 0.39 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 2 | 0.39 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 2 | 0.39 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HG2 | 6 | 0.39 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 6 | 0.39 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HG2 | 6 | 0.39 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HG2 | 8 | 0.39 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 8 | 0.39 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HG2 | 8 | 0.39 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB1 | 3 | 0.39 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB2 | 3 | 0.39 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB3 | 3 | 0.39 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB1 | 5 | 0.39 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB2 | 5 | 0.39 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB3 | 5 | 0.39 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 6 | 0.39 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 10 | 0.39 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 18 | 0.39 |
| (1,865) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HB2 | 11 | 0.39 |
| (1,857) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:23:GLU:HB3 | 9 | 0.39 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 5 | 0.39 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 5 | 0.39 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 5 | 0.39 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 3 | 0.39 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 3 | 0.39 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 3 | 0.39 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 3 | 0.39 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 3 | 0.39 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 3 | 0.39 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 3 | 0.39 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 3 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 3 | 0.39 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 4 | 0.39 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 4 | 0.39 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 4 | 0.39 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HA | 5 | 0.39 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HA | 5 | 0.39 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HA | 5 | 0.39 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB1 | 15 | 0.39 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB2 | 15 | 0.39 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB3 | 15 | 0.39 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB1 | 15 | 0.39 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB2 | 15 | 0.39 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB3 | 15 | 0.39 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB1 | 15 | 0.39 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB2 | 15 | 0.39 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB3 | 15 | 0.39 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 3 | 0.39 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 3 | 0.39 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 3 | 0.39 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 7 | 0.39 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 7 | 0.39 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 7 | 0.39 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:86:CYS:H | 2 | 0.39 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:86:CYS:H | 2 | 0.39 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:86:CYS:H | 2 | 0.39 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:86:CYS:H | 18 | 0.39 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:86:CYS:H | 18 | 0.39 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:86:CYS:H | 18 | 0.39 |
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 6 | 0.39 |
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 9 | 0.39 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 1 | 0.39 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 1 | 0.39 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 1 | 0.39 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 15 | 0.39 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 15 | 0.39 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 15 | 0.39 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD11 | 8 | 0.39 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD12 | 8 | 0.39 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD13 | 8 | 0.39 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD11 | 8 | 0.39 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD12 | 8 | 0.39 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD13 | 8 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD11 | 8 | 0.39 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD12 | 8 | 0.39 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD13 | 8 | 0.39 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 3 | 0.39 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 3 | 0.39 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 3 | 0.39 |
| (1,545) | 1:A:16:GLU:H | 1:A:18:GLN:H | 5 | 0.39 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 17 | 0.39 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 2 | 0.39 |
| (1,210) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 2 | 0.39 |
| (1,200) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:H | 9 | 0.39 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 3 | 0.39 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 3 | 0.39 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 3 | 0.39 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 3 | 0.39 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 3 | 0.39 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 3 | 0.39 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD11 | 4 | 0.39 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 4 | 0.39 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD13 | 4 | 0.39 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD21 | 4 | 0.39 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD22 | 4 | 0.39 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD23 | 4 | 0.39 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD2 | 17 | 0.39 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD3 | 17 | 0.39 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD2 | 17 | 0.39 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD3 | 17 | 0.39 |
| (1,1476) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:25:SER:H | 15 | 0.39 |
| (1,1476) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:25:SER:H | 15 | 0.39 |
| (1,1422) | 1:A:14:SER:HB2 | 1:A:16:GLU:H | 8 | 0.39 |
| (1,1422) | 1:A:14:SER:HB3 | 1:A:16:GLU:H | 8 | 0.39 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB2 | 18 | 0.39 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB3 | 18 | 0.39 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB2 | 20 | 0.39 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB3 | 20 | 0.39 |
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG2 | 1:A:7:LEU:H | 12 | 0.39 |
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG3 | 1:A:7:LEU:H | 12 | 0.39 |
| (1,1326) | 1:A:65:ARG:HG3 | 1:A:66:MET:H | 6 | 0.39 |
| (1,1302) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:6:LYS:H | 9 | 0.39 |
| (1,1250) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:68:ASN:HD21 | 16 | 0.39 |
| (1,1209) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:43:LEU:HA | 12 | 0.39 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB1 | 2 | 0.39 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB2 | 2 | 0.39 |
| (1,1190) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HB3 | 2 | 0.39 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 13 | 0.39 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 16 | 0.39 |
| (1,1123) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:24:ALA:HA | 11 | 0.39 |
| (1,1109) | 1:A:26:ARG:HG3 | 1:A:27:MET:HA | 9 | 0.39 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 15 | 0.39 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 17 | 0.39 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB1 | 20 | 0.38 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB2 | 20 | 0.38 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB3 | 20 | 0.38 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB1 | 12 | 0.38 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB2 | 12 | 0.38 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB3 | 12 | 0.38 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 11 | 0.38 |
| (1,903) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:61:PRO:HB3 | 18 | 0.38 |
| (1,894) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:27:MET:HB3 | 4 | 0.38 |
| (1,865) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HB2 | 15 | 0.38 |
| (1,841) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HB2 | 7 | 0.38 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB1 | 13 | 0.38 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB2 | 13 | 0.38 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB3 | 13 | 0.38 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB1 | 17 | 0.38 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB2 | 17 | 0.38 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB3 | 17 | 0.38 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 16 | 0.38 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 16 | 0.38 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 16 | 0.38 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 3 | 0.38 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 3 | 0.38 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 3 | 0.38 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HA | 13 | 0.38 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HA | 13 | 0.38 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HA | 13 | 0.38 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 17 | 0.38 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 17 | 0.38 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 17 | 0.38 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 11 | 0.38 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 11 | 0.38 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 11 | 0.38 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD11 | 9 | 0.38 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD12 | 9 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD13 | 9 | 0.38 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD11 | 1:A:74:LYS:HE2 | 7 | 0.38 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD12 | 1:A:74:LYS:HE2 | 7 | 0.38 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD13 | 1:A:74:LYS:HE2 | 7 | 0.38 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 6 | 0.38 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 6 | 0.38 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 6 | 0.38 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 8 | 0.38 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 8 | 0.38 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 8 | 0.38 |
| (1,554) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:H | 4 | 0.38 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 7 | 0.38 |
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 10 | 0.38 |
| (1,225) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:H | 3 | 0.38 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG2 | 1:A:89:HIS:H | 1 | 0.38 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG3 | 1:A:89:HIS:H | 1 | 0.38 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG2 | 1 | 0.38 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG3 | 1 | 0.38 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG2 | 1 | 0.38 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG3 | 1 | 0.38 |
| (1,1708) | 1:A:86:CYS:H | 1:A:87:ASP:HB2 | 17 | 0.38 |
| (1,1708) | 1:A:86:CYS:H | 1:A:87:ASP:HB3 | 17 | 0.38 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:66:MET:H | 1 | 0.38 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:MET:H | 1 | 0.38 |
| (1,1612) | 1:A:54:ASN:HA | 1:A:55:GLU:HG2 | 18 | 0.38 |
| (1,1612) | 1:A:54:ASN:HA | 1:A:55:GLU:HG3 | 18 | 0.38 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 5 | 0.38 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 5 | 0.38 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 5 | 0.38 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG3 | 1:A:51:ALA:HB1 | 5 | 0.38 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG3 | 1:A:51:ALA:HB2 | 5 | 0.38 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG3 | 1:A:51:ALA:HB3 | 5 | 0.38 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 9 | 0.38 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 9 | 0.38 |
| (1,1572) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 13 | 0.38 |
| (1,1572) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 13 | 0.38 |
| (1,152) | 1:A:26:ARG:HG2 | 1:A:27:MET:H | 5 | 0.38 |
| (1,1483) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HG2 | 12 | 0.38 |
| (1,1483) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HG3 | 12 | 0.38 |
| (1,1476) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:25:SER:H | 3 | 0.38 |
| (1,1476) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:25:SER:H | 3 | 0.38 |
| (1,1430) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:16:GLU:HG2 | 14 | 0.38 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1430) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:16:GLU:HG3 | 14 | 0.38 |
| (1,1378) | 1:A:4:MET:HB2 | 1:A:6:LYS:H | 5 | 0.38 |
| (1,1378) | 1:A:4:MET:HB3 | 1:A:6:LYS:H | 5 | 0.38 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 10 | 0.38 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 10 | 0.38 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 10 | 0.38 |
| (1,1228) | 1:A:73:ILE:H | 1:A:74:LYS:HE2 | 15 | 0.38 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 19 | 0.38 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 9 | 0.38 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:71:ALA:HA | 2 | 0.38 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:71:ALA:HA | 2 | 0.38 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:71:ALA:HA | 2 | 0.38 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 18 | 0.38 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 18 | 0.38 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 18 | 0.38 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 6 | 0.38 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 11 | 0.38 |
| (1,978) | 1:A:86:CYS:HB2 | 1:A:87:ASP:HA | 14 | 0.37 |
| (1,974) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 1 | 0.37 |
| (1,958) | 1:A:69:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 13 | 0.37 |
| (1,956) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:47:CYS:HA | 2 | 0.37 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB1 | 14 | 0.37 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB2 | 14 | 0.37 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB3 | 14 | 0.37 |
| (1,93) | 1:A:85:LEU:HG | 1:A:86:CYS:H | 16 | 0.37 |
| (1,884) | 1:A:77:GLU:HG2 | 1:A:78:LEU:HA | 9 | 0.37 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:46:GLY:H | 11 | 0.37 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:46:GLY:H | 11 | 0.37 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:46:GLY:H | 11 | 0.37 |
| (1,857) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:23:GLU:HB3 | 10 | 0.37 |
| (1,827) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HG2 | 8 | 0.37 |
| (1,824) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HB3 | 1 | 0.37 |
| (1,789) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HG2 | 12 | 0.37 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 18 | 0.37 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 18 | 0.37 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 18 | 0.37 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 19 | 0.37 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 19 | 0.37 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 19 | 0.37 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 6 | 0.37 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 6 | 0.37 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 6 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 18 | 0.37 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD3 | 2 | 0.37 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD3 | 2 | 0.37 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD3 | 2 | 0.37 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD11 | 13 | 0.37 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD12 | 13 | 0.37 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD13 | 13 | 0.37 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD11 | 8 | 0.37 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD12 | 8 | 0.37 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD13 | 8 | 0.37 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 3 | 0.37 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 3 | 0.37 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 3 | 0.37 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 7 | 0.37 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 7 | 0.37 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 7 | 0.37 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 16 | 0.37 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 16 | 0.37 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 16 | 0.37 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:25:SER:H | 17 | 0.37 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:25:SER:H | 17 | 0.37 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:25:SER:H | 17 | 0.37 |
| (1,545) | 1:A:16:GLU:H | 1:A:18:GLN:H | 12 | 0.37 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 19 | 0.37 |
| (1,526) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:69:ASN:HD21 | 19 | 0.37 |
| (1,475) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:69:ASN:HD22 | 19 | 0.37 |
| (1,447) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:18:GLN:H | 6 | 0.37 |
| (1,417) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HA | 9 | 0.37 |
| (1,385) | 1:A:87:ASP:H | 1:A:88:PRO:HD3 | 13 | 0.37 |
| (1,367) | 1:A:41:HIS:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 7 | 0.37 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 8 | 0.37 |
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 2 | 0.37 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 17 | 0.37 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 9 | 0.37 |
| (1,253) | 1:A:77:GLU:HG3 | 1:A:78:LEU:H | 10 | 0.37 |
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 8 | 0.37 |
| (1,210) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 7 | 0.37 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG2 | 8 | 0.37 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG3 | 8 | 0.37 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG2 | 8 | 0.37 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG3 | 8 | 0.37 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 16 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 16 | 0.37 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 16 | 0.37 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 16 | 0.37 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 16 | 0.37 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 16 | 0.37 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:66:MET:H | 4 | 0.37 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:MET:H | 4 | 0.37 |
| (1,1612) | 1:A:54:ASN:HA | 1:A:55:GLU:HG2 | 10 | 0.37 |
| (1,1612) | 1:A:54:ASN:HA | 1:A:55:GLU:HG3 | 10 | 0.37 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD11 | 3 | 0.37 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 3 | 0.37 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD13 | 3 | 0.37 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD21 | 3 | 0.37 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD22 | 3 | 0.37 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD23 | 3 | 0.37 |
| (1,1443) | 1:A:18:GLN:HG2 | 1:A:19:SER:H | 20 | 0.37 |
| (1,1443) | 1:A:18:GLN:HG3 | 1:A:19:SER:H | 20 | 0.37 |
| (1,1430) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:16:GLU:HG2 | 1 | 0.37 |
| (1,1430) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:16:GLU:HG3 | 1 | 0.37 |
| (1,1430) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:16:GLU:HG2 | 2 | 0.37 |
| (1,1430) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:16:GLU:HG3 | 2 | 0.37 |
| (1,1430) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:16:GLU:HG2 | 11 | 0.37 |
| (1,1430) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:16:GLU:HG3 | 11 | 0.37 |
| (1,1340) | 1:A:84:LYS:HG3 | 1:A:85:LEU:H | 12 | 0.37 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 18 | 0.37 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 18 | 0.37 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 18 | 0.37 |
| (1,1236) | 1:A:50:GLU:HA | 1:A:52:CYS:H | 5 | 0.37 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD11 | 14 | 0.37 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD12 | 14 | 0.37 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD13 | 14 | 0.37 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 15 | 0.37 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 15 | 0.37 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 15 | 0.37 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 10 | 0.37 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 12 | 0.37 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:75:ALA:HA | 15 | 0.37 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:75:ALA:HA | 15 | 0.37 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:75:ALA:HA | 15 | 0.37 |
| (1,1015) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:78:LEU:HG | 10 | 0.37 |
| (1,1007) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 16 | 0.37 |
| (1,1004) | 1:A:40:TYR:HB3 | 1:A:72:ALA:HA | 11 | 0.37 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 19 | 0.37 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 11 | 0.36 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 11 | 0.36 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 11 | 0.36 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HE3 | 14 | 0.36 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HE3 | 14 | 0.36 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HE3 | 14 | 0.36 |
| (1,958) | 1:A:69:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 20 | 0.36 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB1 | 16 | 0.36 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB2 | 16 | 0.36 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB3 | 16 | 0.36 |
| (1,870) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 15 | 0.36 |
| (1,827) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HG2 | 15 | 0.36 |
| (1,826) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HA | 11 | 0.36 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB1 | 9 | 0.36 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB2 | 9 | 0.36 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB3 | 9 | 0.36 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HA | 12 | 0.36 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HA | 12 | 0.36 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HA | 12 | 0.36 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 16 | 0.36 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 16 | 0.36 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 16 | 0.36 |
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 7 | 0.36 |
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 12 | 0.36 |
| (1,674) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD11 | 8 | 0.36 |
| (1,674) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD12 | 8 | 0.36 |
| (1,674) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD13 | 8 | 0.36 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 9 | 0.36 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 9 | 0.36 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 9 | 0.36 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD11 | 20 | 0.36 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD12 | 20 | 0.36 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD13 | 20 | 0.36 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 6 | 0.36 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 6 | 0.36 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 6 | 0.36 |
| (1,41) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:78:LEU:HG | 7 | 0.36 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 13 | 0.36 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 4 | 0.36 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 8 | 0.36 |
| (1,325) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:H | 15 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 8 | 0.36 |
| (1,239) | 1:A:61:PRO:HG2 | 1:A:63:PHE:H | 13 | 0.36 |
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 1 | 0.36 |
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 9 | 0.36 |
| (1,210) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 3 | 0.36 |
| (1,203) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:H | 9 | 0.36 |
| (1,178) | 1:A:23:GLU:H | 1:A:26:ARG:HG3 | 20 | 0.36 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE2 | 1:A:85:LEU:H | 11 | 0.36 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE3 | 1:A:85:LEU:H | 11 | 0.36 |
| (1,1683) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:85:LEU:HD11 | 14 | 0.36 |
| (1,1683) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:85:LEU:HD12 | 14 | 0.36 |
| (1,1683) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:85:LEU:HD13 | 14 | 0.36 |
| (1,1683) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:85:LEU:HD21 | 14 | 0.36 |
| (1,1683) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:85:LEU:HD22 | 14 | 0.36 |
| (1,1683) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:85:LEU:HD23 | 14 | 0.36 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 5 | 0.36 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 5 | 0.36 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 5 | 0.36 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 5 | 0.36 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 5 | 0.36 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 5 | 0.36 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 20 | 0.36 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 20 | 0.36 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 20 | 0.36 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG3 | 1:A:51:ALA:HB1 | 20 | 0.36 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG3 | 1:A:51:ALA:HB2 | 20 | 0.36 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG3 | 1:A:51:ALA:HB3 | 20 | 0.36 |
| (1,1552) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HG2 | 17 | 0.36 |
| (1,1552) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HG3 | 17 | 0.36 |
| (1,152) | 1:A:26:ARG:HG2 | 1:A:27:MET:H | 6 | 0.36 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB2 | 13 | 0.36 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB3 | 13 | 0.36 |
| (1,1402) | 1:A:10:CYS:HB2 | 1:A:11:TYR:HA | 17 | 0.36 |
| (1,1402) | 1:A:10:CYS:HB3 | 1:A:11:TYR:HA | 17 | 0.36 |
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG2 | 1:A:7:LEU:H | 19 | 0.36 |
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG3 | 1:A:7:LEU:H | 19 | 0.36 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 10 | 0.36 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 1 | 0.36 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 1 | 0.36 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 1 | 0.36 |
| (1,1280) | 1:A:6:LYS:HA | 1:A:7:LEU:H | 2 | 0.36 |
| (1,1236) | 1:A:50:GLU:HA | 1:A:52:CYS:H | 11 | 0.36 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1202) | 1:A:76:LEU:HG | 1:A:77:GLU:H | 7 | 0.36 |
| (1,1151) | 1:A:11:TYR:HA | 1:A:11:TYR:HE1 | 7 | 0.36 |
| (1,1137) | 1:A:39:TYR:HE1 | 1:A:85:LEU:HG | 7 | 0.36 |
| (1,1015) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:78:LEU:HG | 3 | 0.36 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 13 | 0.36 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 14 | 0.36 |
| (1,978) | 1:A:86:CYS:HB2 | 1:A:87:ASP:HA | 3 | 0.35 |
| (1,978) | 1:A:86:CYS:HB2 | 1:A:87:ASP:HA | 15 | 0.35 |
| (1,974) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 7 | 0.35 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB1 | 13 | 0.35 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB2 | 13 | 0.35 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB3 | 13 | 0.35 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB1 | 19 | 0.35 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB2 | 19 | 0.35 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB3 | 19 | 0.35 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HG2 | 12 | 0.35 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 12 | 0.35 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HG2 | 12 | 0.35 |
| (1,947) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HG3 | 20 | 0.35 |
| (1,922) | 1:A:66:MET:HG2 | 1:A:70:ALA:HB1 | 17 | 0.35 |
| (1,922) | 1:A:66:MET:HG2 | 1:A:70:ALA:HB2 | 17 | 0.35 |
| (1,922) | 1:A:66:MET:HG2 | 1:A:70:ALA:HB3 | 17 | 0.35 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 5 | 0.35 |
| (1,903) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:61:PRO:HB3 | 15 | 0.35 |
| (1,865) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HB2 | 18 | 0.35 |
| (1,854) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HB3 | 5 | 0.35 |
| (1,840) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:HA | 19 | 0.35 |
| (1,827) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HG2 | 5 | 0.35 |
| (1,824) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HB3 | 13 | 0.35 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 7 | 0.35 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 7 | 0.35 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 7 | 0.35 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 8 | 0.35 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 8 | 0.35 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 8 | 0.35 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 2 | 0.35 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 2 | 0.35 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 2 | 0.35 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 15 | 0.35 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 15 | 0.35 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 15 | 0.35 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HA | 6 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HA | 6 | 0.35 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HA | 6 | 0.35 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG21 | 13 | 0.35 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG22 | 13 | 0.35 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG23 | 13 | 0.35 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD3 | 20 | 0.35 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD3 | 20 | 0.35 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD3 | 20 | 0.35 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 4 | 0.35 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 4 | 0.35 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 4 | 0.35 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 11 | 0.35 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 11 | 0.35 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 11 | 0.35 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 7 | 0.35 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 7 | 0.35 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 7 | 0.35 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 9 | 0.35 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 9 | 0.35 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 9 | 0.35 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 14 | 0.35 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 14 | 0.35 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 14 | 0.35 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 2 | 0.35 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 2 | 0.35 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 2 | 0.35 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 10 | 0.35 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 10 | 0.35 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 10 | 0.35 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 15 | 0.35 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 15 | 0.35 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 15 | 0.35 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 19 | 0.35 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 19 | 0.35 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 19 | 0.35 |
| (1,554) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:H | 9 | 0.35 |
| (1,545) | 1:A:16:GLU:H | 1:A:18:GLN:H | 11 | 0.35 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 19 | 0.35 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 3 | 0.35 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 17 | 0.35 |
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 2 | 0.35 |
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 3 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 8 | 0.35 |
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 17 | 0.35 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 16 | 0.35 |
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 19 | 0.35 |
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 20 | 0.35 |
| (1,325) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:H | 6 | 0.35 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 1 | 0.35 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 18 | 0.35 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:H | 3 | 0.35 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:H | 3 | 0.35 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:H | 3 | 0.35 |
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 6 | 0.35 |
| (1,217) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:H | 20 | 0.35 |
| (1,214) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:63:PHE:H | 15 | 0.35 |
| (1,214) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:63:PHE:H | 19 | 0.35 |
| (1,174) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:26:ARG:HG3 | 7 | 0.35 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG2 | 1:A:89:HIS:H | 7 | 0.35 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG3 | 1:A:89:HIS:H | 7 | 0.35 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG2 | 1:A:89:HIS:H | 17 | 0.35 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG3 | 1:A:89:HIS:H | 17 | 0.35 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 8 | 0.35 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 8 | 0.35 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 8 | 0.35 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 8 | 0.35 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 8 | 0.35 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 8 | 0.35 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:66:MET:H | 10 | 0.35 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:MET:H | 10 | 0.35 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:66:MET:H | 13 | 0.35 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:MET:H | 13 | 0.35 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 2 | 0.35 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 2 | 0.35 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 2 | 0.35 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 2 | 0.35 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 2 | 0.35 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 2 | 0.35 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.35 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.35 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.35 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 16 | 0.35 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 16 | 0.35 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 16 | 0.35 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 19 | 0.35 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 19 | 0.35 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 19 | 0.35 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG3 | 1:A:51:ALA:HB1 | 19 | 0.35 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG3 | 1:A:51:ALA:HB2 | 19 | 0.35 |
| (1,1608) | 1:A:50:GLU:HG3 | 1:A:51:ALA:HB3 | 19 | 0.35 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD11 | 19 | 0.35 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 19 | 0.35 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD13 | 19 | 0.35 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD21 | 19 | 0.35 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD22 | 19 | 0.35 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD23 | 19 | 0.35 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB1 | 6 | 0.35 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB2 | 6 | 0.35 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB3 | 6 | 0.35 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB1 | 6 | 0.35 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB2 | 6 | 0.35 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB3 | 6 | 0.35 |
| (1,1414) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:14:SER:HB2 | 19 | 0.35 |
| (1,1414) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:14:SER:HB3 | 19 | 0.35 |
| (1,1402) | 1:A:10:CYS:HB2 | 1:A:11:TYR:HA | 13 | 0.35 |
| (1,1402) | 1:A:10:CYS:HB3 | 1:A:11:TYR:HA | 13 | 0.35 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 8 | 0.35 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 8 | 0.35 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 8 | 0.35 |
| (1,1272) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:H | 2 | 0.35 |
| (1,1272) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:H | 2 | 0.35 |
| (1,1272) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:H | 2 | 0.35 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HD1 | 17 | 0.35 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HD1 | 17 | 0.35 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HD1 | 17 | 0.35 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 4 | 0.35 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 5 | 0.35 |
| (1,1123) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:24:ALA:HA | 9 | 0.35 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 18 | 0.35 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 18 | 0.35 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 18 | 0.35 |
| (1,1088) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG2 | 11 | 0.35 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 7 | 0.35 |
| (1,1015) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:78:LEU:HG | 14 | 0.35 |
| (1,1004) | 1:A:40:TYR:HB3 | 1:A:72:ALA:HA | 15 | 0.35 |
| (1,974) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 12 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HE3 | 18 | 0.34 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HE3 | 18 | 0.34 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HE3 | 18 | 0.34 |
| (1,958) | 1:A:69:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 5 | 0.34 |
| (1,945) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:88:PRO:HD3 | 9 | 0.34 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 19 | 0.34 |
| (1,870) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 17 | 0.34 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HE1 | 3 | 0.34 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HE2 | 3 | 0.34 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HE3 | 3 | 0.34 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HE1 | 3 | 0.34 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HE2 | 3 | 0.34 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HE3 | 3 | 0.34 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HE1 | 3 | 0.34 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HE2 | 3 | 0.34 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HE3 | 3 | 0.34 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:46:GLY:H | 2 | 0.34 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:46:GLY:H | 2 | 0.34 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:46:GLY:H | 2 | 0.34 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 19 | 0.34 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 19 | 0.34 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 19 | 0.34 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG21 | 18 | 0.34 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG22 | 18 | 0.34 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG23 | 18 | 0.34 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE1 | 1:A:7:LEU:HG | 1 | 0.34 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE2 | 1:A:7:LEU:HG | 1 | 0.34 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE3 | 1:A:7:LEU:HG | 1 | 0.34 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 9 | 0.34 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 9 | 0.34 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 9 | 0.34 |
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 11 | 0.34 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD3 | 12 | 0.34 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD3 | 12 | 0.34 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD3 | 12 | 0.34 |
| (1,671) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 15 | 0.34 |
| (1,671) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 15 | 0.34 |
| (1,671) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 15 | 0.34 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD11 | 19 | 0.34 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD12 | 19 | 0.34 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD13 | 19 | 0.34 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:HA | 9 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:HA | 9 | 0.34 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:HA | 9 | 0.34 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD11 | 6 | 0.34 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD12 | 6 | 0.34 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD13 | 6 | 0.34 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 13 | 0.34 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 13 | 0.34 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 13 | 0.34 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 20 | 0.34 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 20 | 0.34 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 20 | 0.34 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 9 | 0.34 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 9 | 0.34 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 9 | 0.34 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 12 | 0.34 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 12 | 0.34 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 12 | 0.34 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 13 | 0.34 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 13 | 0.34 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 13 | 0.34 |
| (1,565) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:51:ALA:H | 5 | 0.34 |
| (1,565) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:51:ALA:H | 8 | 0.34 |
| (1,565) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:51:ALA:H | 13 | 0.34 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 16 | 0.34 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 7 | 0.34 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 1 | 0.34 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 5 | 0.34 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 14 | 0.34 |
| (1,416) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:HA | 6 | 0.34 |
| (1,41) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:78:LEU:HG | 20 | 0.34 |
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 15 | 0.34 |
| (1,310) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:75:ALA:H | 6 | 0.34 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 1 | 0.34 |
| (1,276) | 1:A:66:MET:HG3 | 1:A:71:ALA:H | 20 | 0.34 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:H | 1 | 0.34 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:H | 1 | 0.34 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:H | 1 | 0.34 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:72:ALA:H | 1 | 0.34 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:72:ALA:H | 1 | 0.34 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:72:ALA:H | 1 | 0.34 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 1 | 0.34 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG2 | 1:A:89:HIS:H | 5 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG3 | 1:A:89:HIS:H | 5 | 0.34 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG2 | 10 | 0.34 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG3 | 10 | 0.34 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG2 | 10 | 0.34 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG3 | 10 | 0.34 |
| (1,1695) | 1:A:83:ALA:HB1 | 1:A:84:LYS:HE2 | 3 | 0.34 |
| (1,1695) | 1:A:83:ALA:HB1 | 1:A:84:LYS:HE3 | 3 | 0.34 |
| (1,1695) | 1:A:83:ALA:HB2 | 1:A:84:LYS:HE2 | 3 | 0.34 |
| (1,1695) | 1:A:83:ALA:HB2 | 1:A:84:LYS:HE3 | 3 | 0.34 |
| (1,1695) | 1:A:83:ALA:HB3 | 1:A:84:LYS:HE2 | 3 | 0.34 |
| (1,1695) | 1:A:83:ALA:HB3 | 1:A:84:LYS:HE3 | 3 | 0.34 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 15 | 0.34 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 15 | 0.34 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 15 | 0.34 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 15 | 0.34 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 15 | 0.34 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 15 | 0.34 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD11 | 12 | 0.34 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 12 | 0.34 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD13 | 12 | 0.34 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD21 | 12 | 0.34 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD22 | 12 | 0.34 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD23 | 12 | 0.34 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD2 | 1 | 0.34 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD3 | 1 | 0.34 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD2 | 1 | 0.34 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD3 | 1 | 0.34 |
| (1,1458) | 1:A:20:ASP:HB2 | 1:A:23:GLU:HB3 | 7 | 0.34 |
| (1,1458) | 1:A:20:ASP:HB3 | 1:A:23:GLU:HB3 | 7 | 0.34 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 11 | 0.34 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 11 | 0.34 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 11 | 0.34 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 19 | 0.34 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 19 | 0.34 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 19 | 0.34 |
| (1,1276) | 1:A:43:LEU:H | 1:A:66:MET:HE1 | 2 | 0.34 |
| (1,1276) | 1:A:43:LEU:H | 1:A:66:MET:HE2 | 2 | 0.34 |
| (1,1276) | 1:A:43:LEU:H | 1:A:66:MET:HE3 | 2 | 0.34 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD11 | 12 | 0.34 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD12 | 12 | 0.34 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD13 | 12 | 0.34 |
| (1,1123) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:24:ALA:HA | 20 | 0.34 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1086) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:61:PRO:HD3 | 2 | 0.34 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 5 | 0.34 |
| (1,1015) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:78:LEU:HG | 17 | 0.34 |
| (1,1012) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:79:TYR:HA | 18 | 0.34 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 5 | 0.34 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 8 | 0.34 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 12 | 0.34 |
| (1,992) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:68:ASN:HB3 | 19 | 0.33 |
| (1,978) | 1:A:86:CYS:HB2 | 1:A:87:ASP:HA | 19 | 0.33 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB1 | 11 | 0.33 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB2 | 11 | 0.33 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB3 | 11 | 0.33 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 19 | 0.33 |
| (1,840) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:HA | 9 | 0.33 |
| (1,827) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HG2 | 11 | 0.33 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 8 | 0.33 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 8 | 0.33 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 8 | 0.33 |
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 5 | 0.33 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB1 | 2 | 0.33 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB2 | 2 | 0.33 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB3 | 2 | 0.33 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB1 | 13 | 0.33 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB2 | 13 | 0.33 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB3 | 13 | 0.33 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB1 | 13 | 0.33 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB2 | 13 | 0.33 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB3 | 13 | 0.33 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB1 | 13 | 0.33 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB2 | 13 | 0.33 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB3 | 13 | 0.33 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 2 | 0.33 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 2 | 0.33 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 2 | 0.33 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 1 | 0.33 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 1 | 0.33 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 1 | 0.33 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 13 | 0.33 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 13 | 0.33 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 13 | 0.33 |
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 16 | 0.33 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 14 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 14 | 0.33 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 14 | 0.33 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD11 | 17 | 0.33 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD12 | 17 | 0.33 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD13 | 17 | 0.33 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 8 | 0.33 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 8 | 0.33 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 8 | 0.33 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 10 | 0.33 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 10 | 0.33 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 10 | 0.33 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:25:SER:H | 12 | 0.33 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:25:SER:H | 12 | 0.33 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:25:SER:H | 12 | 0.33 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:25:SER:H | 16 | 0.33 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:25:SER:H | 16 | 0.33 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:25:SER:H | 16 | 0.33 |
| (1,565) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:51:ALA:H | 10 | 0.33 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 12 | 0.33 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 13 | 0.33 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 10 | 0.33 |
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 9 | 0.33 |
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 15 | 0.33 |
| (1,447) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:18:GLN:H | 17 | 0.33 |
| (1,417) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HA | 18 | 0.33 |
| (1,416) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:HA | 15 | 0.33 |
| (1,399) | 1:A:26:ARG:HA | 1:A:28:LYS:H | 1 | 0.33 |
| (1,367) | 1:A:41:HIS:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 9 | 0.33 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 1 | 0.33 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 5 | 0.33 |
| (1,325) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:H | 20 | 0.33 |
| (1,318) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:52:CYS:HB2 | 1 | 0.33 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 3 | 0.33 |
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 2 | 0.33 |
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 10 | 0.33 |
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 14 | 0.33 |
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 20 | 0.33 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG2 | 8 | 0.33 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG3 | 8 | 0.33 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG2 | 8 | 0.33 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG3 | 8 | 0.33 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 1 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 1 | 0.33 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 1 | 0.33 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 1 | 0.33 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 1 | 0.33 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 1 | 0.33 |
| (1,1553) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HD2 | 7 | 0.33 |
| (1,1553) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HD3 | 7 | 0.33 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 5 | 0.33 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 5 | 0.33 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 15 | 0.33 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 15 | 0.33 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 15 | 0.33 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 15 | 0.33 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 15 | 0.33 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 15 | 0.33 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 15 | 0.33 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 15 | 0.33 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 15 | 0.33 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 15 | 0.33 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 15 | 0.33 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 15 | 0.33 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 15 | 0.33 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 15 | 0.33 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 15 | 0.33 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 15 | 0.33 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 15 | 0.33 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 15 | 0.33 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB1 | 3 | 0.33 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB2 | 3 | 0.33 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB3 | 3 | 0.33 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB1 | 5 | 0.33 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB2 | 5 | 0.33 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB3 | 5 | 0.33 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB2 | 3 | 0.33 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB3 | 3 | 0.33 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB2 | 12 | 0.33 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB3 | 12 | 0.33 |
| (1,1402) | 1:A:10:CYS:HB2 | 1:A:11:TYR:HA | 4 | 0.33 |
| (1,1402) | 1:A:10:CYS:HB3 | 1:A:11:TYR:HA | 4 | 0.33 |
| (1,1401) | 1:A:10:CYS:HB2 | 1:A:11:TYR:H | 12 | 0.33 |
| (1,1401) | 1:A:10:CYS:HB3 | 1:A:11:TYR:H | 12 | 0.33 |
| (1,1272) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:H | 1 | 0.33 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1272) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:H | 1 | 0.33 |
| (1,1272) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:H | 1 | 0.33 |
| (1,1236) | 1:A:50:GLU:HA | 1:A:52:CYS:H | 6 | 0.33 |
| (1,1234) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:83:ALA:HA | 1 | 0.33 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 8 | 0.33 |
| (1,1171) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:H | 10 | 0.33 |
| (1,1124) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:22:ILE:HB | 5 | 0.33 |
| (1,1109) | 1:A:26:ARG:HG3 | 1:A:27:MET:HA | 5 | 0.33 |
| (1,1088) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG2 | 2 | 0.33 |
| (1,1081) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HA | 7 | 0.33 |
| (1,1055) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:66:MET:HG3 | 15 | 0.33 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:75:ALA:HA | 4 | 0.33 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:75:ALA:HA | 4 | 0.33 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:75:ALA:HA | 4 | 0.33 |
| (1,1015) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:78:LEU:HG | 5 | 0.33 |
| (1,1007) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 5 | 0.33 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 7 | 0.33 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 16 | 0.33 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 18 | 0.33 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB1 | 6 | 0.32 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB2 | 6 | 0.32 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB3 | 6 | 0.32 |
| (1,947) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HG3 | 6 | 0.32 |
| (1,947) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HG3 | 17 | 0.32 |
| (1,913) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HD3 | 1 | 0.32 |
| (1,894) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:27:MET:HB3 | 3 | 0.32 |
| (1,824) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HB3 | 3 | 0.32 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 6 | 0.32 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 6 | 0.32 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 6 | 0.32 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 16 | 0.32 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 16 | 0.32 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 16 | 0.32 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE1 | 1:A:7:LEU:HG | 2 | 0.32 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE2 | 1:A:7:LEU:HG | 2 | 0.32 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE3 | 1:A:7:LEU:HG | 2 | 0.32 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HA | 20 | 0.32 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HA | 20 | 0.32 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HA | 20 | 0.32 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB1 | 19 | 0.32 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB2 | 19 | 0.32 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB3 | 19 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB1 | 19 | 0.32 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB2 | 19 | 0.32 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB3 | 19 | 0.32 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB1 | 19 | 0.32 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB2 | 19 | 0.32 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB3 | 19 | 0.32 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG21 | 1 | 0.32 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG22 | 1 | 0.32 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG23 | 1 | 0.32 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:86:CYS:H | 13 | 0.32 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:86:CYS:H | 13 | 0.32 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:86:CYS:H | 13 | 0.32 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG21 | 1:A:63:PHE:H | 5 | 0.32 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG22 | 1:A:63:PHE:H | 5 | 0.32 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG23 | 1:A:63:PHE:H | 5 | 0.32 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD3 | 5 | 0.32 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD3 | 5 | 0.32 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD3 | 5 | 0.32 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD3 | 18 | 0.32 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD3 | 18 | 0.32 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD3 | 18 | 0.32 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 3 | 0.32 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 3 | 0.32 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 3 | 0.32 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB1 | 1:A:59:SER:HA | 20 | 0.32 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB2 | 1:A:59:SER:HA | 20 | 0.32 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB3 | 1:A:59:SER:HA | 20 | 0.32 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD11 | 18 | 0.32 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD12 | 18 | 0.32 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD13 | 18 | 0.32 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 2 | 0.32 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 2 | 0.32 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 2 | 0.32 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 19 | 0.32 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 19 | 0.32 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 19 | 0.32 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD11 | 11 | 0.32 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD12 | 11 | 0.32 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD13 | 11 | 0.32 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD11 | 12 | 0.32 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD12 | 12 | 0.32 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD13 | 12 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 4 | 0.32 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 4 | 0.32 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 4 | 0.32 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 11 | 0.32 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 11 | 0.32 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 11 | 0.32 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 14 | 0.32 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 14 | 0.32 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 14 | 0.32 |
| (1,554) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:H | 11 | 0.32 |
| (1,554) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:H | 13 | 0.32 |
| (1,504) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:12:TRP:HZ2 | 16 | 0.32 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 2 | 0.32 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 4 | 0.32 |
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 7 | 0.32 |
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 3 | 0.32 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 11 | 0.32 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 3 | 0.32 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 3 | 0.32 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 3 | 0.32 |
| (1,417) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HA | 6 | 0.32 |
| (1,416) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:HA | 19 | 0.32 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 6 | 0.32 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 6 | 0.32 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 6 | 0.32 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 10 | 0.32 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 2 | 0.32 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 11 | 0.32 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 17 | 0.32 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 10 | 0.32 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 17 | 0.32 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:H | 8 | 0.32 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:H | 8 | 0.32 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:H | 8 | 0.32 |
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 3 | 0.32 |
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 11 | 0.32 |
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 19 | 0.32 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 5 | 0.32 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 19 | 0.32 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 20 | 0.32 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG2 | 12 | 0.32 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG3 | 12 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG2 | 12 | 0.32 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG3 | 12 | 0.32 |
| (1,1708) | 1:A:86:CYS:H | 1:A:87:ASP:HB2 | 5 | 0.32 |
| (1,1708) | 1:A:86:CYS:H | 1:A:87:ASP:HB3 | 5 | 0.32 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 6 | 0.32 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 6 | 0.32 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 6 | 0.32 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 6 | 0.32 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 6 | 0.32 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 6 | 0.32 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:66:MET:H | 17 | 0.32 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:MET:H | 17 | 0.32 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB2 | 1:A:62:THR:H | 1 | 0.32 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB3 | 1:A:62:THR:H | 1 | 0.32 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB2 | 14 | 0.32 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB3 | 14 | 0.32 |
| (1,1552) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HG2 | 7 | 0.32 |
| (1,1552) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HG3 | 7 | 0.32 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD11 | 1 | 0.32 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 1 | 0.32 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD13 | 1 | 0.32 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD21 | 1 | 0.32 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD22 | 1 | 0.32 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD23 | 1 | 0.32 |
| (1,1483) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HG2 | 5 | 0.32 |
| (1,1483) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HG3 | 5 | 0.32 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:27:MET:H | 9 | 0.32 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:27:MET:H | 9 | 0.32 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD11 | 8 | 0.32 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD12 | 8 | 0.32 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD13 | 8 | 0.32 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD11 | 8 | 0.32 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD12 | 8 | 0.32 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD13 | 8 | 0.32 |
| (1,1440) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:HA | 9 | 0.32 |
| (1,1440) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:HA | 9 | 0.32 |
| (1,1440) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:HA | 14 | 0.32 |
| (1,1440) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:HA | 14 | 0.32 |
| (1,1418) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:14:SER:H | 13 | 0.32 |
| (1,1418) | 1:A:13:LYS:HG3 | 1:A:14:SER:H | 13 | 0.32 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 16 | 0.32 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 16 | 0.32 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 16 | 0.32 |
| (1,1234) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:83:ALA:HA | 17 | 0.32 |
| (1,1081) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HA | 14 | 0.32 |
| (1,1055) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:66:MET:HG3 | 9 | 0.32 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 6 | 0.32 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 9 | 0.32 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 13 | 0.32 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 20 | 0.32 |
| (1,1008) | 1:A:34:HIS:HB3 | 1:A:35:LEU:HA | 19 | 0.32 |
| (1,1007) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 13 | 0.32 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 10 | 0.32 |
| (1,978) | 1:A:86:CYS:HB2 | 1:A:87:ASP:HA | 10 | 0.31 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB1 | 4 | 0.31 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB2 | 4 | 0.31 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB3 | 4 | 0.31 |
| (1,947) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HG3 | 19 | 0.31 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 11 | 0.31 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 15 | 0.31 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 16 | 0.31 |
| (1,913) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HD3 | 10 | 0.31 |
| (1,897) | 1:A:27:MET:HB2 | 1:A:28:LYS:HA | 17 | 0.31 |
| (1,894) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:27:MET:HB3 | 5 | 0.31 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:46:GLY:H | 17 | 0.31 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:46:GLY:H | 17 | 0.31 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:46:GLY:H | 17 | 0.31 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 13 | 0.31 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 13 | 0.31 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 13 | 0.31 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 16 | 0.31 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 16 | 0.31 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 16 | 0.31 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 17 | 0.31 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 17 | 0.31 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 17 | 0.31 |
| (1,815) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 20 | 0.31 |
| (1,815) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 20 | 0.31 |
| (1,815) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 20 | 0.31 |
| (1,756) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HB1 | 17 | 0.31 |
| (1,756) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HB2 | 17 | 0.31 |
| (1,756) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HB3 | 17 | 0.31 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HA | 11 | 0.31 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HA | 11 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HA | 11 | 0.31 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 14 | 0.31 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 14 | 0.31 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 14 | 0.31 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG21 | 15 | 0.31 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG22 | 15 | 0.31 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG23 | 15 | 0.31 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 16 | 0.31 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 16 | 0.31 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 16 | 0.31 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG21 | 1:A:63:PHE:H | 18 | 0.31 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG22 | 1:A:63:PHE:H | 18 | 0.31 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG23 | 1:A:63:PHE:H | 18 | 0.31 |
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 20 | 0.31 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 4 | 0.31 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 4 | 0.31 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 4 | 0.31 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 5 | 0.31 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 5 | 0.31 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 5 | 0.31 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 1 | 0.31 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 15 | 0.31 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 19 | 0.31 |
| (1,463) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:79:TYR:H | 17 | 0.31 |
| (1,454) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:H | 10 | 0.31 |
| (1,454) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:H | 14 | 0.31 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 17 | 0.31 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 17 | 0.31 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 17 | 0.31 |
| (1,426) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:60:CYS:H | 6 | 0.31 |
| (1,398) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:24:ALA:H | 3 | 0.31 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 9 | 0.31 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 19 | 0.31 |
| (1,310) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:75:ALA:H | 5 | 0.31 |
| (1,310) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:75:ALA:H | 16 | 0.31 |
| (1,276) | 1:A:66:MET:HG3 | 1:A:71:ALA:H | 4 | 0.31 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:72:ALA:H | 2 | 0.31 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:72:ALA:H | 2 | 0.31 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:72:ALA:H | 2 | 0.31 |
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 12 | 0.31 |
| (1,214) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:63:PHE:H | 17 | 0.31 |
| (1,183) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HB2 | 6 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 18 | 0.31 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 18 | 0.31 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 18 | 0.31 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 18 | 0.31 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 18 | 0.31 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 18 | 0.31 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:66:MET:H | 18 | 0.31 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:MET:H | 18 | 0.31 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB2 | 1:A:62:THR:H | 7 | 0.31 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB3 | 1:A:62:THR:H | 7 | 0.31 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 20 | 0.31 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 20 | 0.31 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 20 | 0.31 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 20 | 0.31 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 20 | 0.31 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 20 | 0.31 |
| (1,1552) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HG2 | 12 | 0.31 |
| (1,1552) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HG3 | 12 | 0.31 |
| (1,1517) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:33:LYS:HE2 | 4 | 0.31 |
| (1,1517) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:33:LYS:HE3 | 4 | 0.31 |
| (1,1426) | 1:A:15:GLY:HA2 | 1:A:16:GLU:HG2 | 9 | 0.31 |
| (1,1426) | 1:A:15:GLY:HA2 | 1:A:16:GLU:HG3 | 9 | 0.31 |
| (1,1426) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:GLU:HG2 | 9 | 0.31 |
| (1,1426) | 1:A:15:GLY:HA3 | 1:A:16:GLU:HG3 | 9 | 0.31 |
| (1,1418) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:14:SER:H | 7 | 0.31 |
| (1,1418) | 1:A:13:LYS:HG3 | 1:A:14:SER:H | 7 | 0.31 |
| (1,1414) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:14:SER:HB2 | 3 | 0.31 |
| (1,1414) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:14:SER:HB3 | 3 | 0.31 |
| (1,1399) | 1:A:9:GLN:HA | 1:A:9:GLN:HE21 | 5 | 0.31 |
| (1,1399) | 1:A:9:GLN:HA | 1:A:9:GLN:HE22 | 5 | 0.31 |
| (1,1387) | 1:A:6:LYS:HA | 1:A:6:LYS:HD2 | 11 | 0.31 |
| (1,1387) | 1:A:6:LYS:HA | 1:A:6:LYS:HD3 | 11 | 0.31 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG21 | 7 | 0.31 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG22 | 7 | 0.31 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG23 | 7 | 0.31 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HD1 | 3 | 0.31 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HD1 | 3 | 0.31 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HD1 | 3 | 0.31 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HD1 | 13 | 0.31 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HD1 | 13 | 0.31 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HD1 | 13 | 0.31 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 11 | 0.31 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 17 | 0.31 |
| (1,1171) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:H | 8 | 0.31 |
| (1,1163) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:79:TYR:HE2 | 8 | 0.31 |
| (1,1163) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:79:TYR:HE2 | 15 | 0.31 |
| (1,1004) | 1:A:40:TYR:HB3 | 1:A:72:ALA:HA | 16 | 0.31 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 20 | 0.31 |
| (1,978) | 1:A:86:CYS:HB2 | 1:A:87:ASP:HA | 2 | 0.3 |
| (1,974) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 19 | 0.3 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB1 | 15 | 0.3 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB2 | 15 | 0.3 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB3 | 15 | 0.3 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 1 | 0.3 |
| (1,913) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HD3 | 7 | 0.3 |
| (1,913) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HD3 | 15 | 0.3 |
| (1,913) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HD3 | 20 | 0.3 |
| (1,894) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:27:MET:HB3 | 20 | 0.3 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 6 | 0.3 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 6 | 0.3 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 6 | 0.3 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 14 | 0.3 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 14 | 0.3 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 14 | 0.3 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD11 | 6 | 0.3 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD12 | 6 | 0.3 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD13 | 6 | 0.3 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 12 | 0.3 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 12 | 0.3 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 12 | 0.3 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 15 | 0.3 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 15 | 0.3 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 15 | 0.3 |
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 1 | 0.3 |
| (1,793) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 18 | 0.3 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 5 | 0.3 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 5 | 0.3 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 5 | 0.3 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE1 | 1:A:7:LEU:HG | 4 | 0.3 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE2 | 1:A:7:LEU:HG | 4 | 0.3 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE3 | 1:A:7:LEU:HG | 4 | 0.3 |
| (1,724) | 1:A:85:LEU:HG | 1:A:86:CYS:HA | 17 | 0.3 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB1 | 6 | 0.3 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB2 | 6 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB3 | 6 | 0.3 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB1 | 6 | 0.3 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB2 | 6 | 0.3 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB3 | 6 | 0.3 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB1 | 6 | 0.3 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB2 | 6 | 0.3 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB3 | 6 | 0.3 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 1 | 0.3 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 1 | 0.3 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 1 | 0.3 |
| (1,690) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HA | 4 | 0.3 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD3 | 15 | 0.3 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD3 | 15 | 0.3 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD3 | 15 | 0.3 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD11 | 5 | 0.3 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD12 | 5 | 0.3 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD13 | 5 | 0.3 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD11 | 7 | 0.3 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD12 | 7 | 0.3 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD13 | 7 | 0.3 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD11 | 16 | 0.3 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD12 | 16 | 0.3 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD13 | 16 | 0.3 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:25:SER:H | 1 | 0.3 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:25:SER:H | 1 | 0.3 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:25:SER:H | 1 | 0.3 |
| (1,565) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:51:ALA:H | 15 | 0.3 |
| (1,544) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:16:GLU:H | 3 | 0.3 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 6 | 0.3 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 13 | 0.3 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 15 | 0.3 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 17 | 0.3 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 18 | 0.3 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 13 | 0.3 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 7 | 0.3 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 11 | 0.3 |
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 6 | 0.3 |
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 12 | 0.3 |
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 16 | 0.3 |
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 19 | 0.3 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 14 | 0.3 |
| (1,353) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:HIS:HB2 | 5 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 13 | 0.3 |
| (1,328) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:49:ASN:HB2 | 15 | 0.3 |
| (1,328) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:49:ASN:HB2 | 19 | 0.3 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 13 | 0.3 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 18 | 0.3 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 13 | 0.3 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:H | 1 | 0.3 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:H | 1 | 0.3 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:H | 1 | 0.3 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 3 | 0.3 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 12 | 0.3 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 14 | 0.3 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 16 | 0.3 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 20 | 0.3 |
| (1,225) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:H | 14 | 0.3 |
| (1,217) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:H | 6 | 0.3 |
| (1,210) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 19 | 0.3 |
| (1,203) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:H | 18 | 0.3 |
| (1,203) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:H | 19 | 0.3 |
| (1,200) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:H | 5 | 0.3 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 9 | 0.3 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 15 | 0.3 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG2 | 20 | 0.3 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG3 | 20 | 0.3 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG2 | 20 | 0.3 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG3 | 20 | 0.3 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG2 | 1:A:89:HIS:H | 10 | 0.3 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG3 | 1:A:89:HIS:H | 10 | 0.3 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG2 | 1:A:89:HIS:H | 11 | 0.3 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG3 | 1:A:89:HIS:H | 11 | 0.3 |
| (1,1700) | 1:A:84:LYS:HD2 | 1:A:85:LEU:H | 5 | 0.3 |
| (1,1700) | 1:A:84:LYS:HD3 | 1:A:85:LEU:H | 5 | 0.3 |
| (1,1644) | 1:A:67:ASP:HB2 | 1:A:68:ASN:H | 1 | 0.3 |
| (1,1644) | 1:A:67:ASP:HB3 | 1:A:68:ASN:H | 1 | 0.3 |
| (1,1644) | 1:A:67:ASP:HB2 | 1:A:68:ASN:H | 8 | 0.3 |
| (1,1644) | 1:A:67:ASP:HB3 | 1:A:68:ASN:H | 8 | 0.3 |
| (1,1621) | 1:A:59:SER:HB2 | 1:A:60:CYS:HA | 7 | 0.3 |
| (1,1621) | 1:A:59:SER:HB3 | 1:A:60:CYS:HA | 7 | 0.3 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 8 | 0.3 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 8 | 0.3 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 8 | 0.3 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 8 | 0.3 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 8 | 0.3 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 8 | 0.3 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB2 | 3 | 0.3 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB3 | 3 | 0.3 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:27:MET:H | 10 | 0.3 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:27:MET:H | 10 | 0.3 |
| (1,1440) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:HA | 16 | 0.3 |
| (1,1440) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:HA | 16 | 0.3 |
| (1,1439) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:H | 9 | 0.3 |
| (1,1439) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:H | 9 | 0.3 |
| (1,1401) | 1:A:10:CYS:HB2 | 1:A:11:TYR:H | 4 | 0.3 |
| (1,1401) | 1:A:10:CYS:HB3 | 1:A:11:TYR:H | 4 | 0.3 |
| (1,1387) | 1:A:6:LYS:HA | 1:A:6:LYS:HD2 | 20 | 0.3 |
| (1,1387) | 1:A:6:LYS:HA | 1:A:6:LYS:HD3 | 20 | 0.3 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 7 | 0.3 |
| (1,1250) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:68:ASN:HD21 | 14 | 0.3 |
| (1,1236) | 1:A:50:GLU:HA | 1:A:52:CYS:H | 12 | 0.3 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 15 | 0.3 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 15 | 0.3 |
| (1,1171) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:H | 17 | 0.3 |
| (1,1151) | 1:A:11:TYR:HA | 1:A:11:TYR:HE1 | 4 | 0.3 |
| (1,1111) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HA | 11 | 0.3 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:71:ALA:HA | 17 | 0.3 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:71:ALA:HA | 17 | 0.3 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:71:ALA:HA | 17 | 0.3 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 19 | 0.3 |
| (1,1015) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:78:LEU:HG | 11 | 0.3 |
| (1,1015) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:78:LEU:HG | 15 | 0.3 |
| (1,1007) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 6 | 0.3 |
| (1,1007) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 8 | 0.3 |
| (1,1007) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 14 | 0.3 |
| (1,1004) | 1:A:40:TYR:HB3 | 1:A:72:ALA:HA | 3 | 0.3 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 19 | 0.29 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 19 | 0.29 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 19 | 0.29 |
| (1,974) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 16 | 0.29 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HG2 | 20 | 0.29 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 20 | 0.29 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HG2 | 20 | 0.29 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB1 | 2 | 0.29 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB2 | 2 | 0.29 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB3 | 2 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB1 | 8 | 0.29 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB2 | 8 | 0.29 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB3 | 8 | 0.29 |
| (1,947) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HG3 | 12 | 0.29 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 10 | 0.29 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 14 | 0.29 |
| (1,913) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HD3 | 8 | 0.29 |
| (1,894) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:27:MET:HB3 | 12 | 0.29 |
| (1,884) | 1:A:77:GLU:HG2 | 1:A:78:LEU:HA | 14 | 0.29 |
| (1,87) | 1:A:53:THR:HG21 | 1:A:54:ASN:H | 15 | 0.29 |
| (1,87) | 1:A:53:THR:HG22 | 1:A:54:ASN:H | 15 | 0.29 |
| (1,87) | 1:A:53:THR:HG23 | 1:A:54:ASN:H | 15 | 0.29 |
| (1,841) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HB2 | 14 | 0.29 |
| (1,835) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:82:ASN:HA | 11 | 0.29 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD11 | 13 | 0.29 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD12 | 13 | 0.29 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD13 | 13 | 0.29 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 17 | 0.29 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 17 | 0.29 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 17 | 0.29 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 2 | 0.29 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 2 | 0.29 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 2 | 0.29 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 2 | 0.29 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 2 | 0.29 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 2 | 0.29 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 2 | 0.29 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 2 | 0.29 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 2 | 0.29 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 4 | 0.29 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 4 | 0.29 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 4 | 0.29 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 4 | 0.29 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 4 | 0.29 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 4 | 0.29 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 4 | 0.29 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 4 | 0.29 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 4 | 0.29 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 18 | 0.29 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 18 | 0.29 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 18 | 0.29 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 11 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 11 | 0.29 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 11 | 0.29 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB1 | 18 | 0.29 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB2 | 18 | 0.29 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB3 | 18 | 0.29 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB1 | 18 | 0.29 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB2 | 18 | 0.29 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB3 | 18 | 0.29 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB1 | 18 | 0.29 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB2 | 18 | 0.29 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB3 | 18 | 0.29 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD3 | 4 | 0.29 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD3 | 4 | 0.29 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD3 | 4 | 0.29 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD3 | 7 | 0.29 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD3 | 7 | 0.29 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD3 | 7 | 0.29 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 7 | 0.29 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 7 | 0.29 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 7 | 0.29 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 11 | 0.29 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 11 | 0.29 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 11 | 0.29 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD11 | 4 | 0.29 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD12 | 4 | 0.29 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD13 | 4 | 0.29 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD11 | 4 | 0.29 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD12 | 4 | 0.29 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD13 | 4 | 0.29 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD11 | 4 | 0.29 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD12 | 4 | 0.29 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD13 | 4 | 0.29 |
| (1,565) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:51:ALA:H | 11 | 0.29 |
| (1,554) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:H | 5 | 0.29 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:24:ALA:H | 3 | 0.29 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:24:ALA:H | 3 | 0.29 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:24:ALA:H | 3 | 0.29 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 6 | 0.29 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 12 | 0.29 |
| (1,479) | 1:A:11:TYR:HD1 | 1:A:12:TRP:H | 16 | 0.29 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 2 | 0.29 |
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 8 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 11 | 0.29 |
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 13 | 0.29 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 12 | 0.29 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 12 | 0.29 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 12 | 0.29 |
| (1,424) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:13:LYS:HA | 17 | 0.29 |
| (1,416) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:HA | 7 | 0.29 |
| (1,399) | 1:A:26:ARG:HA | 1:A:28:LYS:H | 5 | 0.29 |
| (1,396) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:45:GLU:H | 8 | 0.29 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 10 | 0.29 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 10 | 0.29 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 10 | 0.29 |
| (1,367) | 1:A:41:HIS:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 20 | 0.29 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 1 | 0.29 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 10 | 0.29 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 15 | 0.29 |
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 7 | 0.29 |
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 18 | 0.29 |
| (1,276) | 1:A:66:MET:HG3 | 1:A:71:ALA:H | 1 | 0.29 |
| (1,276) | 1:A:66:MET:HG3 | 1:A:71:ALA:H | 2 | 0.29 |
| (1,276) | 1:A:66:MET:HG3 | 1:A:71:ALA:H | 9 | 0.29 |
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 13 | 0.29 |
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 16 | 0.29 |
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 18 | 0.29 |
| (1,214) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:63:PHE:H | 10 | 0.29 |
| (1,214) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:63:PHE:H | 12 | 0.29 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 11 | 0.29 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 12 | 0.29 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 6 | 0.29 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 14 | 0.29 |
| (1,183) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HB2 | 13 | 0.29 |
| (1,183) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HB2 | 14 | 0.29 |
| (1,178) | 1:A:23:GLU:H | 1:A:26:ARG:HG3 | 2 | 0.29 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG2 | 1:A:89:HIS:H | 6 | 0.29 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG3 | 1:A:89:HIS:H | 6 | 0.29 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG2 | 4 | 0.29 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG3 | 4 | 0.29 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG2 | 4 | 0.29 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG3 | 4 | 0.29 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 20 | 0.29 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 20 | 0.29 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 20 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 20 | 0.29 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 20 | 0.29 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 20 | 0.29 |
| (1,1621) | 1:A:59:SER:HB2 | 1:A:60:CYS:HA | 18 | 0.29 |
| (1,1621) | 1:A:59:SER:HB3 | 1:A:60:CYS:HA | 18 | 0.29 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 10 | 0.29 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 10 | 0.29 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 10 | 0.29 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 10 | 0.29 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 10 | 0.29 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 10 | 0.29 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD2 | 18 | 0.29 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD3 | 18 | 0.29 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD2 | 18 | 0.29 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD3 | 18 | 0.29 |
| (1,1441) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:HB2 | 9 | 0.29 |
| (1,1441) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:HB3 | 9 | 0.29 |
| (1,1441) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:HB2 | 9 | 0.29 |
| (1,1441) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:HB3 | 9 | 0.29 |
| (1,1412) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HD2 | 9 | 0.29 |
| (1,1412) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HD3 | 9 | 0.29 |
| (1,1411) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HG2 | 19 | 0.29 |
| (1,1411) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HG3 | 19 | 0.29 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB2 | 16 | 0.29 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB3 | 16 | 0.29 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 16 | 0.29 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 20 | 0.29 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 14 | 0.29 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 14 | 0.29 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 14 | 0.29 |
| (1,1279) | 1:A:7:LEU:H | 1:A:7:LEU:HG | 11 | 0.29 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD11 | 8 | 0.29 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD12 | 8 | 0.29 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD13 | 8 | 0.29 |
| (1,1202) | 1:A:76:LEU:HG | 1:A:77:GLU:H | 1 | 0.29 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 11 | 0.29 |
| (1,1124) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:22:ILE:HB | 2 | 0.29 |
| (1,1111) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HA | 1 | 0.29 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 1 | 0.29 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 1 | 0.29 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 1 | 0.29 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 6 | 0.29 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 6 | 0.29 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 6 | 0.29 |
| (1,1085) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HA | 5 | 0.29 |
| (1,1081) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HA | 16 | 0.29 |
| (1,1064) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:85:LEU:HG | 10 | 0.29 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 14 | 0.29 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 17 | 0.29 |
| (1,1004) | 1:A:40:TYR:HB3 | 1:A:72:ALA:HA | 8 | 0.29 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 3 | 0.29 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 4 | 0.29 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 20 | 0.28 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 20 | 0.28 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 20 | 0.28 |
| (1,98) | 1:A:55:GLU:HG3 | 1:A:56:PHE:H | 18 | 0.28 |
| (1,974) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 17 | 0.28 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HE3 | 12 | 0.28 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HE3 | 12 | 0.28 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HE3 | 12 | 0.28 |
| (1,958) | 1:A:69:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 6 | 0.28 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB1 | 13 | 0.28 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB2 | 13 | 0.28 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB3 | 13 | 0.28 |
| (1,895) | 1:A:53:THR:HG21 | 1:A:61:PRO:HG2 | 1 | 0.28 |
| (1,895) | 1:A:53:THR:HG22 | 1:A:61:PRO:HG2 | 1 | 0.28 |
| (1,895) | 1:A:53:THR:HG23 | 1:A:61:PRO:HG2 | 1 | 0.28 |
| (1,894) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:27:MET:HB3 | 15 | 0.28 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HE1 | 6 | 0.28 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HE2 | 6 | 0.28 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HE3 | 6 | 0.28 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HE1 | 6 | 0.28 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HE2 | 6 | 0.28 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HE3 | 6 | 0.28 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HE1 | 6 | 0.28 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HE2 | 6 | 0.28 |
| (1,864) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HE3 | 6 | 0.28 |
| (1,854) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HB3 | 3 | 0.28 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 3 | 0.28 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 3 | 0.28 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 3 | 0.28 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 9 | 0.28 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 9 | 0.28 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 9 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD11 | 3 | 0.28 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD12 | 3 | 0.28 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD13 | 3 | 0.28 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD11 | 4 | 0.28 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD12 | 4 | 0.28 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD13 | 4 | 0.28 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 1 | 0.28 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 1 | 0.28 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 1 | 0.28 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 3 | 0.28 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 3 | 0.28 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 3 | 0.28 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 11 | 0.28 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 11 | 0.28 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 11 | 0.28 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 11 | 0.28 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 11 | 0.28 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 11 | 0.28 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG21 | 16 | 0.28 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG22 | 16 | 0.28 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG23 | 16 | 0.28 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HA | 7 | 0.28 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HA | 7 | 0.28 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HA | 7 | 0.28 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HA | 6 | 0.28 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HA | 6 | 0.28 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HA | 6 | 0.28 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 18 | 0.28 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 18 | 0.28 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 18 | 0.28 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG21 | 8 | 0.28 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG22 | 8 | 0.28 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG23 | 8 | 0.28 |
| (1,690) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HA | 15 | 0.28 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG21 | 1:A:63:PHE:H | 16 | 0.28 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG22 | 1:A:63:PHE:H | 16 | 0.28 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG23 | 1:A:63:PHE:H | 16 | 0.28 |
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 13 | 0.28 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 18 | 0.28 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 18 | 0.28 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 18 | 0.28 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD11 | 3 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD12 | 3 | 0.28 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD13 | 3 | 0.28 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD11 | 4 | 0.28 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD12 | 4 | 0.28 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD13 | 4 | 0.28 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD11 | 19 | 0.28 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD12 | 19 | 0.28 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD13 | 19 | 0.28 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:H | 18 | 0.28 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:H | 18 | 0.28 |
| (1,6) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:H | 18 | 0.28 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 12 | 0.28 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:25:SER:H | 8 | 0.28 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:25:SER:H | 8 | 0.28 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:25:SER:H | 8 | 0.28 |
| (1,554) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:H | 3 | 0.28 |
| (1,536) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:60:CYS:H | 4 | 0.28 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 4 | 0.28 |
| (1,526) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:69:ASN:HD21 | 20 | 0.28 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 6 | 0.28 |
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 14 | 0.28 |
| (1,447) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:18:GLN:H | 3 | 0.28 |
| (1,447) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:18:GLN:H | 20 | 0.28 |
| (1,444) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:H | 16 | 0.28 |
| (1,416) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:HA | 4 | 0.28 |
| (1,41) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:78:LEU:HG | 3 | 0.28 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 3 | 0.28 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 3 | 0.28 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 3 | 0.28 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 4 | 0.28 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 4 | 0.28 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 4 | 0.28 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 19 | 0.28 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 19 | 0.28 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 19 | 0.28 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 13 | 0.28 |
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 12 | 0.28 |
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 14 | 0.28 |
| (1,310) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:75:ALA:H | 12 | 0.28 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 9 | 0.28 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 13 | 0.28 |
| (1,265) | 1:A:66:MET:HG2 | 1:A:67:ASP:H | 20 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 15 | 0.28 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 1 | 0.28 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 3 | 0.28 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 18 | 0.28 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE2 | 1:A:85:LEU:H | 16 | 0.28 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE3 | 1:A:85:LEU:H | 16 | 0.28 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 12 | 0.28 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 12 | 0.28 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 12 | 0.28 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 12 | 0.28 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 12 | 0.28 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 12 | 0.28 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:66:MET:H | 9 | 0.28 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:MET:H | 9 | 0.28 |
| (1,1635) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:66:MET:HE1 | 11 | 0.28 |
| (1,1635) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:66:MET:HE2 | 11 | 0.28 |
| (1,1635) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:66:MET:HE3 | 11 | 0.28 |
| (1,1635) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:66:MET:HE1 | 11 | 0.28 |
| (1,1635) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:66:MET:HE2 | 11 | 0.28 |
| (1,1635) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:66:MET:HE3 | 11 | 0.28 |
| (1,1635) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:66:MET:HE1 | 11 | 0.28 |
| (1,1635) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:66:MET:HE2 | 11 | 0.28 |
| (1,1635) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:66:MET:HE3 | 11 | 0.28 |
| (1,1635) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:66:MET:HE1 | 11 | 0.28 |
| (1,1635) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:66:MET:HE2 | 11 | 0.28 |
| (1,1635) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:66:MET:HE3 | 11 | 0.28 |
| (1,1635) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:66:MET:HE1 | 11 | 0.28 |
| (1,1635) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:66:MET:HE2 | 11 | 0.28 |
| (1,1635) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:66:MET:HE3 | 11 | 0.28 |
| (1,1635) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:66:MET:HE1 | 11 | 0.28 |
| (1,1635) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:66:MET:HE2 | 11 | 0.28 |
| (1,1635) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:66:MET:HE3 | 11 | 0.28 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 11 | 0.28 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 11 | 0.28 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 11 | 0.28 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 11 | 0.28 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 11 | 0.28 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 11 | 0.28 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 13 | 0.28 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 13 | 0.28 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 13 | 0.28 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 13 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 13 | 0.28 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 13 | 0.28 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD21 | 4 | 0.28 |
| (1,1601) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:49:ASN:HD22 | 4 | 0.28 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 8 | 0.28 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 8 | 0.28 |
| (1,1552) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HG2 | 5 | 0.28 |
| (1,1552) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:38:ARG:HG3 | 5 | 0.28 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD11 | 1:A:38:ARG:HD2 | 7 | 0.28 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD11 | 1:A:38:ARG:HD3 | 7 | 0.28 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:38:ARG:HD2 | 7 | 0.28 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:38:ARG:HD3 | 7 | 0.28 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:38:ARG:HD2 | 7 | 0.28 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:38:ARG:HD3 | 7 | 0.28 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD21 | 1:A:38:ARG:HD2 | 7 | 0.28 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD21 | 1:A:38:ARG:HD3 | 7 | 0.28 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:38:ARG:HD2 | 7 | 0.28 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:38:ARG:HD3 | 7 | 0.28 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:38:ARG:HD2 | 7 | 0.28 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:38:ARG:HD3 | 7 | 0.28 |
| (1,1524) | 1:A:33:LYS:HG2 | 1:A:34:HIS:HA | 2 | 0.28 |
| (1,1524) | 1:A:33:LYS:HG3 | 1:A:34:HIS:HA | 2 | 0.28 |
| (1,152) | 1:A:26:ARG:HG2 | 1:A:27:MET:H | 19 | 0.28 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 15 | 0.28 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 15 | 0.28 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 17 | 0.28 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 17 | 0.28 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD2 | 3 | 0.28 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD3 | 3 | 0.28 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD2 | 3 | 0.28 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD3 | 3 | 0.28 |
| (1,1418) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:14:SER:H | 20 | 0.28 |
| (1,1418) | 1:A:13:LYS:HG3 | 1:A:14:SER:H | 20 | 0.28 |
| (1,1412) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HD2 | 19 | 0.28 |
| (1,1412) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HD3 | 19 | 0.28 |
| (1,1406) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HG2 | 20 | 0.28 |
| (1,1406) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HG3 | 20 | 0.28 |
| (1,1378) | 1:A:4:MET:HB2 | 1:A:6:LYS:H | 13 | 0.28 |
| (1,1378) | 1:A:4:MET:HB3 | 1:A:6:LYS:H | 13 | 0.28 |
| (1,1351) | 1:A:47:CYS:HA | 1:A:87:ASP:H | 1 | 0.28 |
| (1,1331) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:66:MET:H | 19 | 0.28 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HD1 | 2 | 0.28 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HD1 | 2 | 0.28 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HD1 | 2 | 0.28 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HD1 | 6 | 0.28 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HD1 | 6 | 0.28 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HD1 | 6 | 0.28 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 9 | 0.28 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 16 | 0.28 |
| (1,1151) | 1:A:11:TYR:HA | 1:A:11:TYR:HE1 | 17 | 0.28 |
| (1,1015) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:78:LEU:HG | 2 | 0.28 |
| (1,1015) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:78:LEU:HG | 18 | 0.28 |
| (1,1008) | 1:A:34:HIS:HB3 | 1:A:35:LEU:HA | 6 | 0.28 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 1 | 0.28 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 19 | 0.27 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 19 | 0.27 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 19 | 0.27 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HG2 | 4 | 0.27 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 4 | 0.27 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HG2 | 4 | 0.27 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB1 | 20 | 0.27 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB2 | 20 | 0.27 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB3 | 20 | 0.27 |
| (1,947) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HG3 | 16 | 0.27 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 15 | 0.27 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 15 | 0.27 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 15 | 0.27 |
| (1,903) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:61:PRO:HB3 | 16 | 0.27 |
| (1,897) | 1:A:27:MET:HB2 | 1:A:28:LYS:HA | 9 | 0.27 |
| (1,869) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:77:GLU:HB2 | 10 | 0.27 |
| (1,869) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:77:GLU:HB2 | 10 | 0.27 |
| (1,869) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:77:GLU:HB2 | 10 | 0.27 |
| (1,854) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HB3 | 17 | 0.27 |
| (1,840) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:HA | 3 | 0.27 |
| (1,840) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:HA | 13 | 0.27 |
| (1,835) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:82:ASN:HA | 20 | 0.27 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 4 | 0.27 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 4 | 0.27 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 4 | 0.27 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 10 | 0.27 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 10 | 0.27 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 10 | 0.27 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 19 | 0.27 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 19 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 19 | 0.27 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD11 | 15 | 0.27 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD12 | 15 | 0.27 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD13 | 15 | 0.27 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 7 | 0.27 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 7 | 0.27 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 7 | 0.27 |
| (1,789) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HG2 | 5 | 0.27 |
| (1,783) | 1:A:68:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 12 | 0.27 |
| (1,783) | 1:A:68:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 12 | 0.27 |
| (1,783) | 1:A:68:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 12 | 0.27 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 3 | 0.27 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 3 | 0.27 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 3 | 0.27 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB1 | 9 | 0.27 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB2 | 9 | 0.27 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB3 | 9 | 0.27 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 6 | 0.27 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 6 | 0.27 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 6 | 0.27 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 6 | 0.27 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 6 | 0.27 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 6 | 0.27 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG21 | 1:A:63:PHE:H | 7 | 0.27 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG22 | 1:A:63:PHE:H | 7 | 0.27 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG23 | 1:A:63:PHE:H | 7 | 0.27 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG21 | 1:A:63:PHE:H | 20 | 0.27 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG22 | 1:A:63:PHE:H | 20 | 0.27 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG23 | 1:A:63:PHE:H | 20 | 0.27 |
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 3 | 0.27 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD3 | 9 | 0.27 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD3 | 9 | 0.27 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD3 | 9 | 0.27 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 10 | 0.27 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 10 | 0.27 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 10 | 0.27 |
| (1,653) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HG | 7 | 0.27 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD11 | 12 | 0.27 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD12 | 12 | 0.27 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD13 | 12 | 0.27 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD11 | 13 | 0.27 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD12 | 13 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD13 | 13 | 0.27 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 19 | 0.27 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 19 | 0.27 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 19 | 0.27 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:25:SER:H | 7 | 0.27 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:25:SER:H | 7 | 0.27 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:25:SER:H | 7 | 0.27 |
| (1,565) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:51:ALA:H | 1 | 0.27 |
| (1,554) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:H | 14 | 0.27 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 5 | 0.27 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 8 | 0.27 |
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 2 | 0.27 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 19 | 0.27 |
| (1,444) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:H | 13 | 0.27 |
| (1,41) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:78:LEU:HG | 15 | 0.27 |
| (1,405) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:65:ARG:HA | 18 | 0.27 |
| (1,399) | 1:A:26:ARG:HA | 1:A:28:LYS:H | 10 | 0.27 |
| (1,398) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:24:ALA:H | 7 | 0.27 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 13 | 0.27 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 13 | 0.27 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 13 | 0.27 |
| (1,360) | 1:A:57:CYS:HB2 | 1:A:60:CYS:H | 1 | 0.27 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 6 | 0.27 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 12 | 0.27 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 20 | 0.27 |
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 6 | 0.27 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 6 | 0.27 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 14 | 0.27 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 14 | 0.27 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:H | 11 | 0.27 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:H | 11 | 0.27 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:H | 11 | 0.27 |
| (1,289) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:27:MET:HG2 | 6 | 0.27 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 4 | 0.27 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 5 | 0.27 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 8 | 0.27 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:H | 14 | 0.27 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:H | 14 | 0.27 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:H | 14 | 0.27 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:H | 17 | 0.27 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:H | 17 | 0.27 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:H | 17 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,214) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:63:PHE:H | 9 | 0.27 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 8 | 0.27 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 10 | 0.27 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 11 | 0.27 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 16 | 0.27 |
| (1,189) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:H | 15 | 0.27 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG2 | 1:A:89:HIS:H | 9 | 0.27 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG3 | 1:A:89:HIS:H | 9 | 0.27 |
| (1,1693) | 1:A:83:ALA:HA | 1:A:84:LYS:HE2 | 2 | 0.27 |
| (1,1693) | 1:A:83:ALA:HA | 1:A:84:LYS:HE3 | 2 | 0.27 |
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE2 | 1:A:81:ILE:H | 6 | 0.27 |
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE3 | 1:A:81:ILE:H | 6 | 0.27 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 9 | 0.27 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 9 | 0.27 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 9 | 0.27 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 9 | 0.27 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 9 | 0.27 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 9 | 0.27 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 19 | 0.27 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 19 | 0.27 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 19 | 0.27 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 19 | 0.27 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 19 | 0.27 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 19 | 0.27 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB2 | 6 | 0.27 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB3 | 6 | 0.27 |
| (1,1471) | 1:A:23:GLU:HA | 1:A:26:ARG:HD2 | 3 | 0.27 |
| (1,1471) | 1:A:23:GLU:HA | 1:A:26:ARG:HD3 | 3 | 0.27 |
| (1,1440) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:HA | 2 | 0.27 |
| (1,1440) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:HA | 2 | 0.27 |
| (1,1418) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:14:SER:H | 18 | 0.27 |
| (1,1418) | 1:A:13:LYS:HG3 | 1:A:14:SER:H | 18 | 0.27 |
| (1,1412) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HD2 | 8 | 0.27 |
| (1,1412) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HD3 | 8 | 0.27 |
| (1,1411) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HG2 | 8 | 0.27 |
| (1,1411) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HG3 | 8 | 0.27 |
| (1,1411) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HG2 | 9 | 0.27 |
| (1,1411) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HG3 | 9 | 0.27 |
| (1,1408) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HE2 | 16 | 0.27 |
| (1,1408) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HE3 | 16 | 0.27 |
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG2 | 1:A:7:LEU:H | 8 | 0.27 |
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG3 | 1:A:7:LEU:H | 8 | 0.27 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG2 | 1:A:7:LEU:H | 17 | 0.27 |
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG3 | 1:A:7:LEU:H | 17 | 0.27 |
| (1,1326) | 1:A:65:ARG:HG3 | 1:A:66:MET:H | 17 | 0.27 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 1 | 0.27 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 4 | 0.27 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 12 | 0.27 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 14 | 0.27 |
| (1,1088) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG2 | 8 | 0.27 |
| (1,1080) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:74:LYS:HE3 | 7 | 0.27 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 3 | 0.27 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 3 | 0.27 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 3 | 0.27 |
| (1,1065) | 1:A:55:GLU:HA | 1:A:55:GLU:HG3 | 5 | 0.27 |
| (1,1045) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:45:GLU:HA | 1 | 0.27 |
| (1,1040) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HD3 | 2 | 0.27 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:75:ALA:HA | 2 | 0.27 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:75:ALA:HA | 2 | 0.27 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:75:ALA:HA | 2 | 0.27 |
| (1,1017) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:57:CYS:HB2 | 19 | 0.27 |
| (1,1012) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:79:TYR:HA | 7 | 0.27 |
| (1,1007) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 18 | 0.27 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 4 | 0.26 |
| (1,93) | 1:A:85:LEU:HG | 1:A:86:CYS:H | 17 | 0.26 |
| (1,913) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HD3 | 12 | 0.26 |
| (1,913) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HD3 | 14 | 0.26 |
| (1,913) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HD3 | 16 | 0.26 |
| (1,870) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 11 | 0.26 |
| (1,827) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HG2 | 19 | 0.26 |
| (1,824) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HB3 | 5 | 0.26 |
| (1,824) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HB3 | 10 | 0.26 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 13 | 0.26 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 13 | 0.26 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 13 | 0.26 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG21 | 6 | 0.26 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG22 | 6 | 0.26 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG23 | 6 | 0.26 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 9 | 0.26 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 9 | 0.26 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 9 | 0.26 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 9 | 0.26 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 9 | 0.26 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 9 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 9 | 0.26 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 9 | 0.26 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 9 | 0.26 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB1 | 8 | 0.26 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB2 | 8 | 0.26 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB3 | 8 | 0.26 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB1 | 10 | 0.26 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB2 | 10 | 0.26 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB3 | 10 | 0.26 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HA | 9 | 0.26 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HA | 9 | 0.26 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HA | 9 | 0.26 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 10 | 0.26 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 10 | 0.26 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 10 | 0.26 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG21 | 1:A:63:PHE:H | 6 | 0.26 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG22 | 1:A:63:PHE:H | 6 | 0.26 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG23 | 1:A:63:PHE:H | 6 | 0.26 |
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 14 | 0.26 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB1 | 1:A:59:SER:HA | 14 | 0.26 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB2 | 1:A:59:SER:HA | 14 | 0.26 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB3 | 1:A:59:SER:HA | 14 | 0.26 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 12 | 0.26 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 12 | 0.26 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 12 | 0.26 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 15 | 0.26 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 15 | 0.26 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 15 | 0.26 |
| (1,565) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:51:ALA:H | 18 | 0.26 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:24:ALA:H | 15 | 0.26 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:24:ALA:H | 15 | 0.26 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:24:ALA:H | 15 | 0.26 |
| (1,536) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:60:CYS:H | 18 | 0.26 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 11 | 0.26 |
| (1,479) | 1:A:11:TYR:HD1 | 1:A:12:TRP:H | 17 | 0.26 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 17 | 0.26 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 8 | 0.26 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 13 | 0.26 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 20 | 0.26 |
| (1,461) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:83:ALA:H | 4 | 0.26 |
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 5 | 0.26 |
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 19 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 9 | 0.26 |
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 10 | 0.26 |
| (1,447) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:18:GLN:H | 5 | 0.26 |
| (1,41) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:78:LEU:HG | 1 | 0.26 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 7 | 0.26 |
| (1,328) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:49:ASN:HB2 | 3 | 0.26 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 5 | 0.26 |
| (1,325) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:H | 12 | 0.26 |
| (1,310) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:75:ALA:H | 9 | 0.26 |
| (1,310) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:75:ALA:H | 10 | 0.26 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 18 | 0.26 |
| (1,276) | 1:A:66:MET:HG3 | 1:A:71:ALA:H | 13 | 0.26 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 15 | 0.26 |
| (1,243) | 1:A:37:GLU:HB2 | 1:A:39:TYR:H | 5 | 0.26 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:72:ALA:H | 8 | 0.26 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:72:ALA:H | 8 | 0.26 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:72:ALA:H | 8 | 0.26 |
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 7 | 0.26 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 2 | 0.26 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 3 | 0.26 |
| (1,203) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:H | 1 | 0.26 |
| (1,203) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:H | 17 | 0.26 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 8 | 0.26 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 12 | 0.26 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 17 | 0.26 |
| (1,189) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:H | 9 | 0.26 |
| (1,1709) | 1:A:86:CYS:HA | 1:A:87:ASP:HB2 | 3 | 0.26 |
| (1,1709) | 1:A:86:CYS:HA | 1:A:87:ASP:HB3 | 3 | 0.26 |
| (1,1709) | 1:A:86:CYS:HA | 1:A:87:ASP:HB2 | 9 | 0.26 |
| (1,1709) | 1:A:86:CYS:HA | 1:A:87:ASP:HB3 | 9 | 0.26 |
| (1,1700) | 1:A:84:LYS:HD2 | 1:A:85:LEU:H | 12 | 0.26 |
| (1,1700) | 1:A:84:LYS:HD3 | 1:A:85:LEU:H | 12 | 0.26 |
| (1,1693) | 1:A:83:ALA:HA | 1:A:84:LYS:HE2 | 3 | 0.26 |
| (1,1693) | 1:A:83:ALA:HA | 1:A:84:LYS:HE3 | 3 | 0.26 |
| (1,1682) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 4 | 0.26 |
| (1,1682) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 4 | 0.26 |
| (1,1644) | 1:A:67:ASP:HB2 | 1:A:68:ASN:H | 5 | 0.26 |
| (1,1644) | 1:A:67:ASP:HB3 | 1:A:68:ASN:H | 5 | 0.26 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:66:MET:H | 11 | 0.26 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:MET:H | 11 | 0.26 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 4 | 0.26 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 4 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 4 | 0.26 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 4 | 0.26 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 4 | 0.26 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 4 | 0.26 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB2 | 5 | 0.26 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB3 | 5 | 0.26 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB2 | 12 | 0.26 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB3 | 12 | 0.26 |
| (1,1530) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:38:ARG:HD2 | 16 | 0.26 |
| (1,1530) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:38:ARG:HD3 | 16 | 0.26 |
| (1,1517) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:33:LYS:HE2 | 15 | 0.26 |
| (1,1517) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:33:LYS:HE3 | 15 | 0.26 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 14 | 0.26 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 14 | 0.26 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB1 | 19 | 0.26 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB2 | 19 | 0.26 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB3 | 19 | 0.26 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB1 | 19 | 0.26 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB2 | 19 | 0.26 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB3 | 19 | 0.26 |
| (1,1379) | 1:A:4:MET:HG2 | 1:A:5:GLU:H | 9 | 0.26 |
| (1,1379) | 1:A:4:MET:HG3 | 1:A:5:GLU:H | 9 | 0.26 |
| (1,1326) | 1:A:65:ARG:HG3 | 1:A:66:MET:H | 8 | 0.26 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 6 | 0.26 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 6 | 0.26 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 6 | 0.26 |
| (1,1240) | 1:A:52:CYS:H | 1:A:60:CYS:HA | 2 | 0.26 |
| (1,1234) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:83:ALA:HA | 9 | 0.26 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 20 | 0.26 |
| (1,1186) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HA | 9 | 0.26 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 7 | 0.26 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 9 | 0.26 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 10 | 0.26 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 17 | 0.26 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 18 | 0.26 |
| (1,1171) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:H | 13 | 0.26 |
| (1,1163) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:79:TYR:HE2 | 1 | 0.26 |
| (1,1124) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:22:ILE:HB | 10 | 0.26 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 3 | 0.26 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 3 | 0.26 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 3 | 0.26 |
| (1,1088) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG2 | 20 | 0.26 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1065) | 1:A:55:GLU:HA | 1:A:55:GLU:HG3 | 10 | 0.26 |
| (1,1065) | 1:A:55:GLU:HA | 1:A:55:GLU:HG3 | 18 | 0.26 |
| (1,1065) | 1:A:55:GLU:HA | 1:A:55:GLU:HG3 | 20 | 0.26 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:75:ALA:HA | 18 | 0.26 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:75:ALA:HA | 18 | 0.26 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:75:ALA:HA | 18 | 0.26 |
| (1,1007) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 2 | 0.26 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 2 | 0.26 |
| (1,992) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:68:ASN:HB3 | 8 | 0.25 |
| (1,974) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 13 | 0.25 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB1 | 5 | 0.25 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB2 | 5 | 0.25 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB3 | 5 | 0.25 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HE3 | 19 | 0.25 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HE3 | 19 | 0.25 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HE3 | 19 | 0.25 |
| (1,958) | 1:A:69:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 3 | 0.25 |
| (1,958) | 1:A:69:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 9 | 0.25 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HG2 | 14 | 0.25 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 14 | 0.25 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HG2 | 14 | 0.25 |
| (1,922) | 1:A:66:MET:HG2 | 1:A:70:ALA:HB1 | 20 | 0.25 |
| (1,922) | 1:A:66:MET:HG2 | 1:A:70:ALA:HB2 | 20 | 0.25 |
| (1,922) | 1:A:66:MET:HG2 | 1:A:70:ALA:HB3 | 20 | 0.25 |
| (1,910) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG3 | 10 | 0.25 |
| (1,894) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:27:MET:HB3 | 10 | 0.25 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB1 | 17 | 0.25 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB2 | 17 | 0.25 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB3 | 17 | 0.25 |
| (1,865) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HB2 | 3 | 0.25 |
| (1,865) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HB2 | 5 | 0.25 |
| (1,865) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HB2 | 6 | 0.25 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 18 | 0.25 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 18 | 0.25 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 18 | 0.25 |
| (1,824) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HB3 | 8 | 0.25 |
| (1,824) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HB3 | 12 | 0.25 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 2 | 0.25 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 2 | 0.25 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 2 | 0.25 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 12 | 0.25 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 12 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 12 | 0.25 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 15 | 0.25 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 15 | 0.25 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 15 | 0.25 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 14 | 0.25 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 14 | 0.25 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 14 | 0.25 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 19 | 0.25 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 19 | 0.25 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 19 | 0.25 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 19 | 0.25 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 19 | 0.25 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 19 | 0.25 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 19 | 0.25 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 19 | 0.25 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 19 | 0.25 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB1 | 14 | 0.25 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB2 | 14 | 0.25 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB3 | 14 | 0.25 |
| (1,742) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 18 | 0.25 |
| (1,742) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 18 | 0.25 |
| (1,742) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 18 | 0.25 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB1 | 15 | 0.25 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB2 | 15 | 0.25 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB3 | 15 | 0.25 |
| (1,724) | 1:A:85:LEU:HG | 1:A:86:CYS:HA | 6 | 0.25 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG21 | 16 | 0.25 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG22 | 16 | 0.25 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG23 | 16 | 0.25 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG21 | 1:A:63:PHE:H | 13 | 0.25 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG22 | 1:A:63:PHE:H | 13 | 0.25 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG23 | 1:A:63:PHE:H | 13 | 0.25 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 11 | 0.25 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 11 | 0.25 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 11 | 0.25 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD3 | 3 | 0.25 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD3 | 3 | 0.25 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD3 | 3 | 0.25 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:HA | 8 | 0.25 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:HA | 8 | 0.25 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:HA | 8 | 0.25 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD11 | 13 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD12 | 13 | 0.25 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD13 | 13 | 0.25 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD11 | 13 | 0.25 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD12 | 13 | 0.25 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD13 | 13 | 0.25 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD11 | 13 | 0.25 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD12 | 13 | 0.25 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD13 | 13 | 0.25 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD11 | 8 | 0.25 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD12 | 8 | 0.25 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD13 | 8 | 0.25 |
| (1,582) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:H | 17 | 0.25 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:25:SER:H | 2 | 0.25 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:25:SER:H | 2 | 0.25 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:25:SER:H | 2 | 0.25 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 17 | 0.25 |
| (1,463) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:79:TYR:H | 8 | 0.25 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 5 | 0.25 |
| (1,420) | 1:A:48:GLY:HA3 | 1:A:89:HIS:H | 14 | 0.25 |
| (1,398) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:24:ALA:H | 2 | 0.25 |
| (1,398) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:24:ALA:H | 10 | 0.25 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 12 | 0.25 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 12 | 0.25 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 12 | 0.25 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 18 | 0.25 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 18 | 0.25 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 18 | 0.25 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 2 | 0.25 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 4 | 0.25 |
| (1,325) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:H | 16 | 0.25 |
| (1,324) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:H | 3 | 0.25 |
| (1,319) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:86:CYS:HB2 | 6 | 0.25 |
| (1,310) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:75:ALA:H | 3 | 0.25 |
| (1,310) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:75:ALA:H | 11 | 0.25 |
| (1,310) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:75:ALA:H | 19 | 0.25 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 7 | 0.25 |
| (1,289) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:27:MET:HG2 | 5 | 0.25 |
| (1,276) | 1:A:66:MET:HG3 | 1:A:71:ALA:H | 7 | 0.25 |
| (1,260) | 1:A:61:PRO:HB2 | 1:A:63:PHE:H | 16 | 0.25 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:72:ALA:H | 15 | 0.25 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:72:ALA:H | 15 | 0.25 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:72:ALA:H | 15 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 4 | 0.25 |
| (1,214) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:63:PHE:H | 20 | 0.25 |
| (1,212) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:67:ASP:H | 17 | 0.25 |
| (1,189) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:H | 19 | 0.25 |
| (1,183) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HB2 | 8 | 0.25 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG2 | 12 | 0.25 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG3 | 12 | 0.25 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG2 | 12 | 0.25 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG3 | 12 | 0.25 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG2 | 1:A:89:HIS:H | 3 | 0.25 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG3 | 1:A:89:HIS:H | 3 | 0.25 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG2 | 1:A:89:HIS:H | 19 | 0.25 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG3 | 1:A:89:HIS:H | 19 | 0.25 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:66:MET:H | 14 | 0.25 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:MET:H | 14 | 0.25 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB2 | 1:A:62:THR:H | 5 | 0.25 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB3 | 1:A:62:THR:H | 5 | 0.25 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB2 | 1 | 0.25 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB3 | 1 | 0.25 |
| (1,160) | 1:A:79:TYR:H | 1:A:80:LYS:HG3 | 9 | 0.25 |
| (1,1521) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:34:HIS:HA | 1 | 0.25 |
| (1,1521) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:34:HIS:HA | 1 | 0.25 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 8 | 0.25 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 8 | 0.25 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 18 | 0.25 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 18 | 0.25 |
| (1,1440) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:HA | 3 | 0.25 |
| (1,1440) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:HA | 3 | 0.25 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB2 | 6 | 0.25 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB3 | 6 | 0.25 |
| (1,1340) | 1:A:84:LYS:HG3 | 1:A:85:LEU:H | 15 | 0.25 |
| (1,1220) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:81:ILE:H | 19 | 0.25 |
| (1,1202) | 1:A:76:LEU:HG | 1:A:77:GLU:H | 18 | 0.25 |
| (1,1197) | 1:A:12:TRP:HD1 | 1:A:13:LYS:HA | 14 | 0.25 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 2 | 0.25 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 3 | 0.25 |
| (1,1151) | 1:A:11:TYR:HA | 1:A:11:TYR:HE1 | 19 | 0.25 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:71:ALA:HA | 4 | 0.25 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:71:ALA:HA | 4 | 0.25 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:71:ALA:HA | 4 | 0.25 |
| (1,1081) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HA | 6 | 0.25 |
| (1,1081) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HA | 20 | 0.25 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1080) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:74:LYS:HE3 | 15 | 0.25 |
| (1,1055) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:66:MET:HG3 | 2 | 0.25 |
| (1,1055) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:66:MET:HG3 | 5 | 0.25 |
| (1,1040) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HD3 | 19 | 0.25 |
| (1,1012) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:79:TYR:HA | 14 | 0.25 |
| (1,1008) | 1:A:34:HIS:HB3 | 1:A:35:LEU:HA | 14 | 0.25 |
| (1,1004) | 1:A:40:TYR:HB3 | 1:A:72:ALA:HA | 1 | 0.25 |
| (1,997) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HB3 | 15 | 0.24 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 17 | 0.24 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 17 | 0.24 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 17 | 0.24 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 18 | 0.24 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 18 | 0.24 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 18 | 0.24 |
| (1,98) | 1:A:55:GLU:HG3 | 1:A:56:PHE:H | 5 | 0.24 |
| (1,974) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 8 | 0.24 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB1 | 4 | 0.24 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB2 | 4 | 0.24 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB3 | 4 | 0.24 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 3 | 0.24 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 6 | 0.24 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 6 | 0.24 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 6 | 0.24 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 13 | 0.24 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 13 | 0.24 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 13 | 0.24 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 17 | 0.24 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 17 | 0.24 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 17 | 0.24 |
| (1,910) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG3 | 2 | 0.24 |
| (1,910) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG3 | 4 | 0.24 |
| (1,87) | 1:A:53:THR:HG21 | 1:A:54:ASN:H | 11 | 0.24 |
| (1,87) | 1:A:53:THR:HG22 | 1:A:54:ASN:H | 11 | 0.24 |
| (1,87) | 1:A:53:THR:HG23 | 1:A:54:ASN:H | 11 | 0.24 |
| (1,854) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HB3 | 1 | 0.24 |
| (1,854) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HB3 | 20 | 0.24 |
| (1,824) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HB3 | 11 | 0.24 |
| (1,824) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HB3 | 15 | 0.24 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 10 | 0.24 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 10 | 0.24 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 10 | 0.24 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 18 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 18 | 0.24 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 18 | 0.24 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 20 | 0.24 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 20 | 0.24 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 20 | 0.24 |
| (1,690) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HA | 5 | 0.24 |
| (1,690) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HA | 17 | 0.24 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG21 | 1:A:63:PHE:H | 1 | 0.24 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG22 | 1:A:63:PHE:H | 1 | 0.24 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG23 | 1:A:63:PHE:H | 1 | 0.24 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG21 | 1:A:63:PHE:H | 4 | 0.24 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG22 | 1:A:63:PHE:H | 4 | 0.24 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG23 | 1:A:63:PHE:H | 4 | 0.24 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 8 | 0.24 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 8 | 0.24 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 8 | 0.24 |
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 17 | 0.24 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB1 | 1:A:59:SER:HA | 5 | 0.24 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB2 | 1:A:59:SER:HA | 5 | 0.24 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB3 | 1:A:59:SER:HA | 5 | 0.24 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD11 | 2 | 0.24 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD12 | 2 | 0.24 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD13 | 2 | 0.24 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD11 | 2 | 0.24 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD12 | 2 | 0.24 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD13 | 2 | 0.24 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD11 | 2 | 0.24 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD12 | 2 | 0.24 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD13 | 2 | 0.24 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 11 | 0.24 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 11 | 0.24 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 11 | 0.24 |
| (1,554) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:H | 19 | 0.24 |
| (1,513) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:H | 2 | 0.24 |
| (1,513) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:H | 9 | 0.24 |
| (1,513) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:H | 12 | 0.24 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 16 | 0.24 |
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 18 | 0.24 |
| (1,447) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:18:GLN:H | 11 | 0.24 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 8 | 0.24 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 8 | 0.24 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 8 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 14 | 0.24 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 14 | 0.24 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 14 | 0.24 |
| (1,424) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:13:LYS:HA | 18 | 0.24 |
| (1,417) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HA | 2 | 0.24 |
| (1,41) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:78:LEU:HG | 17 | 0.24 |
| (1,360) | 1:A:57:CYS:HB2 | 1:A:60:CYS:H | 9 | 0.24 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 19 | 0.24 |
| (1,354) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:42:GLN:H | 5 | 0.24 |
| (1,328) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:49:ASN:HB2 | 20 | 0.24 |
| (1,310) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:75:ALA:H | 1 | 0.24 |
| (1,310) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:75:ALA:H | 13 | 0.24 |
| (1,292) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:86:CYS:H | 15 | 0.24 |
| (1,289) | 1:A:24:ALA:H | 1:A:27:MET:HG2 | 13 | 0.24 |
| (1,243) | 1:A:37:GLU:HB2 | 1:A:39:TYR:H | 17 | 0.24 |
| (1,225) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:H | 7 | 0.24 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 7 | 0.24 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 19 | 0.24 |
| (1,203) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:H | 10 | 0.24 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 4 | 0.24 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 7 | 0.24 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG2 | 1:A:89:HIS:H | 15 | 0.24 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG3 | 1:A:89:HIS:H | 15 | 0.24 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 13 | 0.24 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 13 | 0.24 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 13 | 0.24 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 13 | 0.24 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 13 | 0.24 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 13 | 0.24 |
| (1,1644) | 1:A:67:ASP:HB2 | 1:A:68:ASN:H | 3 | 0.24 |
| (1,1644) | 1:A:67:ASP:HB3 | 1:A:68:ASN:H | 3 | 0.24 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:HB2 | 1 | 0.24 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:HB2 | 1 | 0.24 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:HB2 | 1 | 0.24 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HB2 | 1 | 0.24 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HB2 | 1 | 0.24 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HB2 | 1 | 0.24 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB2 | 2 | 0.24 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB3 | 2 | 0.24 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB2 | 20 | 0.24 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB3 | 20 | 0.24 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 14 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 14 | 0.24 |
| (1,1521) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:34:HIS:HA | 6 | 0.24 |
| (1,1521) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:34:HIS:HA | 6 | 0.24 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD11 | 2 | 0.24 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 2 | 0.24 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD13 | 2 | 0.24 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD21 | 2 | 0.24 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD22 | 2 | 0.24 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD23 | 2 | 0.24 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE2 | 14 | 0.24 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE3 | 14 | 0.24 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB1 | 16 | 0.24 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB2 | 16 | 0.24 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB3 | 16 | 0.24 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB1 | 16 | 0.24 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB2 | 16 | 0.24 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB3 | 16 | 0.24 |
| (1,1439) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:H | 2 | 0.24 |
| (1,1439) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:H | 2 | 0.24 |
| (1,1431) | 1:A:16:GLU:HB2 | 1:A:17:PRO:HD2 | 18 | 0.24 |
| (1,1431) | 1:A:16:GLU:HB2 | 1:A:17:PRO:HD3 | 18 | 0.24 |
| (1,1431) | 1:A:16:GLU:HB3 | 1:A:17:PRO:HD2 | 18 | 0.24 |
| (1,1431) | 1:A:16:GLU:HB3 | 1:A:17:PRO:HD3 | 18 | 0.24 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB1 | 11 | 0.24 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB2 | 11 | 0.24 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB3 | 11 | 0.24 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB1 | 15 | 0.24 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB2 | 15 | 0.24 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB3 | 15 | 0.24 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB1 | 19 | 0.24 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB2 | 19 | 0.24 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB3 | 19 | 0.24 |
| (1,1394) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:8:HIS:HB2 | 20 | 0.24 |
| (1,1394) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:8:HIS:HB3 | 20 | 0.24 |
| (1,1379) | 1:A:4:MET:HG2 | 1:A:5:GLU:H | 8 | 0.24 |
| (1,1379) | 1:A:4:MET:HG3 | 1:A:5:GLU:H | 8 | 0.24 |
| (1,1377) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:5:GLU:HG2 | 9 | 0.24 |
| (1,1377) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:5:GLU:HG3 | 9 | 0.24 |
| (1,1372) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:54:ASN:H | 11 | 0.24 |
| (1,1340) | 1:A:84:LYS:HG3 | 1:A:85:LEU:H | 5 | 0.24 |
| (1,1340) | 1:A:84:LYS:HG3 | 1:A:85:LEU:H | 10 | 0.24 |
| (1,1338) | 1:A:89:HIS:H | 1:A:90:PRO:HA | 1 | 0.24 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1338) | 1:A:89:HIS:H | 1:A:90:PRO:HA | 10 | 0.24 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG21 | 12 | 0.24 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG22 | 12 | 0.24 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG23 | 12 | 0.24 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 9 | 0.24 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 9 | 0.24 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 9 | 0.24 |
| (1,1202) | 1:A:76:LEU:HG | 1:A:77:GLU:H | 16 | 0.24 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 6 | 0.24 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 13 | 0.24 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 19 | 0.24 |
| (1,1171) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:H | 3 | 0.24 |
| (1,1171) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:H | 9 | 0.24 |
| (1,1163) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:79:TYR:HE2 | 4 | 0.24 |
| (1,1111) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HA | 14 | 0.24 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 4 | 0.24 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 4 | 0.24 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 4 | 0.24 |
| (1,1088) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG2 | 19 | 0.24 |
| (1,1086) | 1:A:51:ALA:HA | 1:A:61:PRO:HD3 | 14 | 0.24 |
| (1,1085) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HA | 12 | 0.24 |
| (1,1081) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HA | 19 | 0.24 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 10 | 0.24 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 10 | 0.24 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 10 | 0.24 |
| (1,1047) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HA | 5 | 0.24 |
| (1,1017) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:57:CYS:HB2 | 3 | 0.24 |
| (1,1017) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:57:CYS:HB2 | 4 | 0.24 |
| (1,1017) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:57:CYS:HB2 | 13 | 0.24 |
| (1,1007) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 15 | 0.24 |
| (1,974) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 3 | 0.23 |
| (1,974) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 10 | 0.23 |
| (1,958) | 1:A:69:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 4 | 0.23 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 15 | 0.23 |
| (1,941) | 1:A:23:GLU:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 4 | 0.23 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 3 | 0.23 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 3 | 0.23 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 3 | 0.23 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 7 | 0.23 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 7 | 0.23 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 7 | 0.23 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 19 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 19 | 0.23 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 19 | 0.23 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 20 | 0.23 |
| (1,884) | 1:A:77:GLU:HG2 | 1:A:78:LEU:HA | 20 | 0.23 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:46:GLY:H | 1 | 0.23 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:46:GLY:H | 1 | 0.23 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:46:GLY:H | 1 | 0.23 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:46:GLY:H | 9 | 0.23 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:46:GLY:H | 9 | 0.23 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:46:GLY:H | 9 | 0.23 |
| (1,854) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HB3 | 11 | 0.23 |
| (1,854) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HB3 | 15 | 0.23 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 2 | 0.23 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 2 | 0.23 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 2 | 0.23 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 3 | 0.23 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 3 | 0.23 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 3 | 0.23 |
| (1,835) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:82:ASN:HA | 15 | 0.23 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB1 | 1:A:78:LEU:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB2 | 1:A:78:LEU:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB3 | 1:A:78:LEU:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,791) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 18 | 0.23 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HA | 12 | 0.23 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HA | 12 | 0.23 |
| (1,734) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HA | 12 | 0.23 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HA | 5 | 0.23 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HA | 5 | 0.23 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HA | 5 | 0.23 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 12 | 0.23 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 12 | 0.23 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 12 | 0.23 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 12 | 0.23 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 12 | 0.23 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 12 | 0.23 |
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 8 | 0.23 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 17 | 0.23 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 17 | 0.23 |
| (1,672) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 17 | 0.23 |
| (1,653) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HG | 17 | 0.23 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB1 | 1:A:59:SER:HA | 3 | 0.23 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB2 | 1:A:59:SER:HA | 3 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB3 | 1:A:59:SER:HA | 3 | 0.23 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD11 | 6 | 0.23 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD12 | 6 | 0.23 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD13 | 6 | 0.23 |
| (1,625) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HB3 | 20 | 0.23 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD11 | 13 | 0.23 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD12 | 13 | 0.23 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD13 | 13 | 0.23 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD11 | 16 | 0.23 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD12 | 16 | 0.23 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD13 | 16 | 0.23 |
| (1,513) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:H | 5 | 0.23 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 3 | 0.23 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 4 | 0.23 |
| (1,468) | 1:A:36:ILE:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 15 | 0.23 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 18 | 0.23 |
| (1,461) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:83:ALA:H | 20 | 0.23 |
| (1,454) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:H | 7 | 0.23 |
| (1,454) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:H | 13 | 0.23 |
| (1,447) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:18:GLN:H | 4 | 0.23 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 20 | 0.23 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 18 | 0.23 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 18 | 0.23 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 18 | 0.23 |
| (1,424) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:13:LYS:HA | 5 | 0.23 |
| (1,424) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:13:LYS:HA | 6 | 0.23 |
| (1,424) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:13:LYS:HA | 10 | 0.23 |
| (1,416) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:HA | 11 | 0.23 |
| (1,405) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:65:ARG:HA | 4 | 0.23 |
| (1,4) | 1:A:78:LEU:HD11 | 1:A:84:LYS:H | 9 | 0.23 |
| (1,4) | 1:A:78:LEU:HD12 | 1:A:84:LYS:H | 9 | 0.23 |
| (1,4) | 1:A:78:LEU:HD13 | 1:A:84:LYS:H | 9 | 0.23 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 5 | 0.23 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 5 | 0.23 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 5 | 0.23 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 14 | 0.23 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 14 | 0.23 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 14 | 0.23 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 17 | 0.23 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 17 | 0.23 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 17 | 0.23 |
| (1,367) | 1:A:41:HIS:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 4 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,367) | 1:A:41:HIS:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 12 | 0.23 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:83:ALA:H | 6 | 0.23 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:83:ALA:H | 6 | 0.23 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:83:ALA:H | 6 | 0.23 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 16 | 0.23 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 12 | 0.23 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:H | 14 | 0.23 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:H | 14 | 0.23 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:H | 14 | 0.23 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:H | 17 | 0.23 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:H | 17 | 0.23 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:H | 17 | 0.23 |
| (1,287) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:H | 17 | 0.23 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 10 | 0.23 |
| (1,260) | 1:A:61:PRO:HB2 | 1:A:63:PHE:H | 4 | 0.23 |
| (1,254) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 5 | 0.23 |
| (1,254) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 10 | 0.23 |
| (1,254) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 13 | 0.23 |
| (1,254) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 14 | 0.23 |
| (1,254) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 15 | 0.23 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:72:ALA:H | 9 | 0.23 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:72:ALA:H | 9 | 0.23 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:72:ALA:H | 9 | 0.23 |
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 17 | 0.23 |
| (1,217) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:H | 3 | 0.23 |
| (1,203) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:H | 4 | 0.23 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 2 | 0.23 |
| (1,189) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:H | 1 | 0.23 |
| (1,183) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HB2 | 5 | 0.23 |
| (1,183) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HB2 | 16 | 0.23 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE2 | 1:A:85:LEU:H | 10 | 0.23 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE3 | 1:A:85:LEU:H | 10 | 0.23 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 17 | 0.23 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 17 | 0.23 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 18 | 0.23 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 18 | 0.23 |
| (1,1682) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 11 | 0.23 |
| (1,1682) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 11 | 0.23 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB1 | 1 | 0.23 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB2 | 1 | 0.23 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB3 | 1 | 0.23 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB1 | 7 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB2 | 7 | 0.23 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB3 | 7 | 0.23 |
| (1,1621) | 1:A:59:SER:HB2 | 1:A:60:CYS:HA | 2 | 0.23 |
| (1,1621) | 1:A:59:SER:HB3 | 1:A:60:CYS:HA | 2 | 0.23 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 17 | 0.23 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 17 | 0.23 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 17 | 0.23 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 17 | 0.23 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 17 | 0.23 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 17 | 0.23 |
| (1,152) | 1:A:26:ARG:HG2 | 1:A:27:MET:H | 3 | 0.23 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 4 | 0.23 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 4 | 0.23 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 10 | 0.23 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 10 | 0.23 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 9 | 0.23 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 9 | 0.23 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 9 | 0.23 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 9 | 0.23 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 9 | 0.23 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 9 | 0.23 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 9 | 0.23 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 9 | 0.23 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 9 | 0.23 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 9 | 0.23 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 9 | 0.23 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 9 | 0.23 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 9 | 0.23 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 9 | 0.23 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 9 | 0.23 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 9 | 0.23 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 9 | 0.23 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 9 | 0.23 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD11 | 17 | 0.23 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 17 | 0.23 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD13 | 17 | 0.23 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD21 | 17 | 0.23 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD22 | 17 | 0.23 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD23 | 17 | 0.23 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE2 | 20 | 0.23 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE3 | 20 | 0.23 |
| (1,1421) | 1:A:14:SER:HA | 1:A:16:GLU:HG2 | 17 | 0.23 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1421) | 1:A:14:SER:HA | 1:A:16:GLU:HG3 | 17 | 0.23 |
| (1,1385) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:6:LYS:HB2 | 1 | 0.23 |
| (1,1385) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:6:LYS:HB3 | 1 | 0.23 |
| (1,1342) | 1:A:54:ASN:HD22 | 1:A:84:LYS:HG2 | 18 | 0.23 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 4 | 0.23 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 4 | 0.23 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 4 | 0.23 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 7 | 0.23 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 7 | 0.23 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 7 | 0.23 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD11 | 15 | 0.23 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD12 | 15 | 0.23 |
| (1,1235) | 1:A:56:PHE:HE1 | 1:A:81:ILE:HD13 | 15 | 0.23 |
| (1,1231) | 1:A:55:GLU:HG3 | 1:A:56:PHE:HD1 | 16 | 0.23 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 20 | 0.23 |
| (1,1171) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:H | 11 | 0.23 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:71:ALA:HA | 13 | 0.23 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:71:ALA:HA | 13 | 0.23 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:71:ALA:HA | 13 | 0.23 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:71:ALA:HA | 15 | 0.23 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:71:ALA:HA | 15 | 0.23 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:71:ALA:HA | 15 | 0.23 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 10 | 0.23 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 10 | 0.23 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 10 | 0.23 |
| (1,1081) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HA | 12 | 0.23 |
| (1,1066) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:66:MET:HE1 | 17 | 0.23 |
| (1,1066) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:66:MET:HE2 | 17 | 0.23 |
| (1,1066) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:66:MET:HE3 | 17 | 0.23 |
| (1,1055) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:66:MET:HG3 | 10 | 0.23 |
| (1,1054) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:65:ARG:HA | 17 | 0.23 |
| (1,1040) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HD3 | 5 | 0.23 |
| (1,1040) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HD3 | 17 | 0.23 |
| (1,1017) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:57:CYS:HB2 | 14 | 0.23 |
| (1,1007) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 3 | 0.23 |
| (1,1007) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 17 | 0.23 |
| (1,1004) | 1:A:40:TYR:HB3 | 1:A:72:ALA:HA | 2 | 0.23 |
| (1,986) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:HA | 2 | 0.22 |
| (1,958) | 1:A:69:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 1 | 0.22 |
| (1,958) | 1:A:69:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 8 | 0.22 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HG2 | 5 | 0.22 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 5 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HG2 | 5 | 0.22 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB1 | 18 | 0.22 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB2 | 18 | 0.22 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB3 | 18 | 0.22 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB1 | 19 | 0.22 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB2 | 19 | 0.22 |
| (1,950) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:HB3 | 19 | 0.22 |
| (1,941) | 1:A:23:GLU:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 18 | 0.22 |
| (1,93) | 1:A:85:LEU:HG | 1:A:86:CYS:H | 7 | 0.22 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 12 | 0.22 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 12 | 0.22 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 12 | 0.22 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 14 | 0.22 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 14 | 0.22 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 14 | 0.22 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 9 | 0.22 |
| (1,900) | 1:A:87:ASP:HA | 1:A:88:PRO:HB3 | 20 | 0.22 |
| (1,894) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:27:MET:HB3 | 1 | 0.22 |
| (1,894) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:27:MET:HB3 | 17 | 0.22 |
| (1,865) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HB2 | 8 | 0.22 |
| (1,840) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:HA | 1 | 0.22 |
| (1,840) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:HA | 4 | 0.22 |
| (1,840) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:HA | 10 | 0.22 |
| (1,835) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:82:ASN:HA | 5 | 0.22 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB1 | 1:A:78:LEU:HB2 | 20 | 0.22 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB2 | 1:A:78:LEU:HB2 | 20 | 0.22 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB3 | 1:A:78:LEU:HB2 | 20 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 6 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 6 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 6 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 6 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 6 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 6 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 6 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 6 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 6 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 12 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 12 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 12 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 12 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 12 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 12 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 12 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 12 | 0.22 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 12 | 0.22 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB1 | 4 | 0.22 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB2 | 4 | 0.22 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB3 | 4 | 0.22 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB1 | 18 | 0.22 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB2 | 18 | 0.22 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB3 | 18 | 0.22 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG21 | 11 | 0.22 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG22 | 11 | 0.22 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG23 | 11 | 0.22 |
| (1,717) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HG13 | 7 | 0.22 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD21 | 1:A:86:CYS:H | 3 | 0.22 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD22 | 1:A:86:CYS:H | 3 | 0.22 |
| (1,7) | 1:A:85:LEU:HD23 | 1:A:86:CYS:H | 3 | 0.22 |
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 19 | 0.22 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD3 | 6 | 0.22 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD3 | 6 | 0.22 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD3 | 6 | 0.22 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD3 | 16 | 0.22 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD3 | 16 | 0.22 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD3 | 16 | 0.22 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD11 | 14 | 0.22 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD12 | 14 | 0.22 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD13 | 14 | 0.22 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD11 | 15 | 0.22 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD12 | 15 | 0.22 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD13 | 15 | 0.22 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD11 | 20 | 0.22 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD12 | 20 | 0.22 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD13 | 20 | 0.22 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:HA | 6 | 0.22 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:HA | 6 | 0.22 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:HA | 6 | 0.22 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD11 | 4 | 0.22 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD12 | 4 | 0.22 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD13 | 4 | 0.22 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD11 | 4 | 0.22 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD12 | 4 | 0.22 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD13 | 4 | 0.22 |
| (1,536) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:60:CYS:H | 5 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,509) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:56:PHE:H | 20 | 0.22 |
| (1,505) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:52:CYS:H | 4 | 0.22 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 7 | 0.22 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 12 | 0.22 |
| (1,424) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:13:LYS:HA | 9 | 0.22 |
| (1,417) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HA | 7 | 0.22 |
| (1,416) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:HA | 10 | 0.22 |
| (1,405) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:65:ARG:HA | 5 | 0.22 |
| (1,400) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:75:ALA:H | 1 | 0.22 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:83:ALA:H | 9 | 0.22 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:83:ALA:H | 9 | 0.22 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:83:ALA:H | 9 | 0.22 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:83:ALA:H | 18 | 0.22 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:83:ALA:H | 18 | 0.22 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:83:ALA:H | 18 | 0.22 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 8 | 0.22 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 9 | 0.22 |
| (1,325) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:H | 9 | 0.22 |
| (1,319) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:86:CYS:HB2 | 2 | 0.22 |
| (1,310) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:75:ALA:H | 2 | 0.22 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 6 | 0.22 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:H | 8 | 0.22 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:H | 8 | 0.22 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:H | 8 | 0.22 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 19 | 0.22 |
| (1,254) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 6 | 0.22 |
| (1,254) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 11 | 0.22 |
| (1,254) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 12 | 0.22 |
| (1,254) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 17 | 0.22 |
| (1,254) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 18 | 0.22 |
| (1,251) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:60:CYS:H | 18 | 0.22 |
| (1,217) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:H | 4 | 0.22 |
| (1,217) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:H | 16 | 0.22 |
| (1,214) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:63:PHE:H | 8 | 0.22 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 17 | 0.22 |
| (1,203) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:H | 5 | 0.22 |
| (1,203) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:H | 14 | 0.22 |
| (1,200) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:H | 18 | 0.22 |
| (1,189) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:H | 4 | 0.22 |
| (1,189) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:H | 10 | 0.22 |
| (1,189) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:H | 13 | 0.22 |
| (1,183) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HB2 | 1 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1716) | 1:A:89:HIS:H | 1:A:89:HIS:HB2 | 9 | 0.22 |
| (1,1716) | 1:A:89:HIS:H | 1:A:89:HIS:HB3 | 9 | 0.22 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE2 | 1:A:85:LEU:H | 6 | 0.22 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE3 | 1:A:85:LEU:H | 6 | 0.22 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB1 | 16 | 0.22 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB2 | 16 | 0.22 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB3 | 16 | 0.22 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 2 | 0.22 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 2 | 0.22 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 2 | 0.22 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 2 | 0.22 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 2 | 0.22 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 2 | 0.22 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 17 | 0.22 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 17 | 0.22 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 17 | 0.22 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 17 | 0.22 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 17 | 0.22 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 17 | 0.22 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:66:MET:H | 2 | 0.22 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:MET:H | 2 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 1 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 1 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 1 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 1 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 1 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 1 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 5 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 5 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 5 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 5 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 5 | 0.22 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 5 | 0.22 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB2 | 8 | 0.22 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB3 | 8 | 0.22 |
| (1,1554) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:85:LEU:HD11 | 17 | 0.22 |
| (1,1554) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:85:LEU:HD12 | 17 | 0.22 |
| (1,1554) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:85:LEU:HD13 | 17 | 0.22 |
| (1,1554) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:85:LEU:HD21 | 17 | 0.22 |
| (1,1554) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:85:LEU:HD22 | 17 | 0.22 |
| (1,1554) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:85:LEU:HD23 | 17 | 0.22 |
| (1,1521) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:34:HIS:HA | 12 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1521) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:34:HIS:HA | 12 | 0.22 |
| (1,152) | 1:A:26:ARG:HG2 | 1:A:27:MET:H | 10 | 0.22 |
| (1,1517) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:33:LYS:HE2 | 14 | 0.22 |
| (1,1517) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:33:LYS:HE3 | 14 | 0.22 |
| (1,1484) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HD2 | 7 | 0.22 |
| (1,1484) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HD3 | 7 | 0.22 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:27:MET:H | 1 | 0.22 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:27:MET:H | 1 | 0.22 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD2 | 11 | 0.22 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD3 | 11 | 0.22 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD2 | 11 | 0.22 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD3 | 11 | 0.22 |
| (1,1401) | 1:A:10:CYS:HB2 | 1:A:11:TYR:H | 17 | 0.22 |
| (1,1401) | 1:A:10:CYS:HB3 | 1:A:11:TYR:H | 17 | 0.22 |
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG2 | 1:A:7:LEU:H | 18 | 0.22 |
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG3 | 1:A:7:LEU:H | 18 | 0.22 |
| (1,1342) | 1:A:54:ASN:HD22 | 1:A:84:LYS:HG2 | 2 | 0.22 |
| (1,1330) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:74:LYS:H | 9 | 0.22 |
| (1,1326) | 1:A:65:ARG:HG3 | 1:A:66:MET:H | 18 | 0.22 |
| (1,1299) | 1:A:4:MET:HE1 | 1:A:6:LYS:H | 2 | 0.22 |
| (1,1299) | 1:A:4:MET:HE2 | 1:A:6:LYS:H | 2 | 0.22 |
| (1,1299) | 1:A:4:MET:HE3 | 1:A:6:LYS:H | 2 | 0.22 |
| (1,1290) | 1:A:4:MET:HE1 | 1:A:7:LEU:H | 15 | 0.22 |
| (1,1290) | 1:A:4:MET:HE2 | 1:A:7:LEU:H | 15 | 0.22 |
| (1,1290) | 1:A:4:MET:HE3 | 1:A:7:LEU:H | 15 | 0.22 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 13 | 0.22 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 13 | 0.22 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 13 | 0.22 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HD1 | 1 | 0.22 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HD1 | 1 | 0.22 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HD1 | 1 | 0.22 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HD1 | 4 | 0.22 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HD1 | 4 | 0.22 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HD1 | 4 | 0.22 |
| (1,1186) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HA | 14 | 0.22 |
| (1,1180) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 8 | 0.22 |
| (1,1151) | 1:A:11:TYR:HA | 1:A:11:TYR:HE1 | 5 | 0.22 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 2 | 0.22 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 2 | 0.22 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 2 | 0.22 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 14 | 0.22 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 14 | 0.22 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 14 | 0.22 |
| (1,1055) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:66:MET:HG3 | 1 | 0.22 |
| (1,1055) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:66:MET:HG3 | 4 | 0.22 |
| (1,1047) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HA | 10 | 0.22 |
| (1,1040) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HD3 | 6 | 0.22 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:75:ALA:HA | 5 | 0.22 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:75:ALA:HA | 5 | 0.22 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:75:ALA:HA | 5 | 0.22 |
| (1,1017) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:57:CYS:HB2 | 20 | 0.22 |
| (1,1007) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 4 | 0.22 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 2 | 0.21 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 2 | 0.21 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 2 | 0.21 |
| (1,974) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 6 | 0.21 |
| (1,974) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 14 | 0.21 |
| (1,974) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 20 | 0.21 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HG2 | 15 | 0.21 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 15 | 0.21 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HG2 | 15 | 0.21 |
| (1,942) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:50:GLU:HB3 | 9 | 0.21 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 16 | 0.21 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 16 | 0.21 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 16 | 0.21 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 18 | 0.21 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 18 | 0.21 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 18 | 0.21 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 20 | 0.21 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 20 | 0.21 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 20 | 0.21 |
| (1,910) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG3 | 12 | 0.21 |
| (1,900) | 1:A:87:ASP:HA | 1:A:88:PRO:HB3 | 7 | 0.21 |
| (1,900) | 1:A:87:ASP:HA | 1:A:88:PRO:HB3 | 9 | 0.21 |
| (1,884) | 1:A:77:GLU:HG2 | 1:A:78:LEU:HA | 5 | 0.21 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG21 | 9 | 0.21 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG22 | 9 | 0.21 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG23 | 9 | 0.21 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG21 | 20 | 0.21 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG22 | 20 | 0.21 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG23 | 20 | 0.21 |
| (1,866) | 1:A:43:LEU:HB2 | 1:A:66:MET:HE1 | 17 | 0.21 |
| (1,866) | 1:A:43:LEU:HB2 | 1:A:66:MET:HE2 | 17 | 0.21 |
| (1,866) | 1:A:43:LEU:HB2 | 1:A:66:MET:HE3 | 17 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,865) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HB2 | 10 | 0.21 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:46:GLY:H | 4 | 0.21 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:46:GLY:H | 4 | 0.21 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:46:GLY:H | 4 | 0.21 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:46:GLY:H | 8 | 0.21 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:46:GLY:H | 8 | 0.21 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:46:GLY:H | 8 | 0.21 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 13 | 0.21 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 13 | 0.21 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 13 | 0.21 |
| (1,835) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:82:ASN:HA | 6 | 0.21 |
| (1,824) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HB3 | 14 | 0.21 |
| (1,824) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HB3 | 17 | 0.21 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 11 | 0.21 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 11 | 0.21 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 11 | 0.21 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 20 | 0.21 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 20 | 0.21 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 20 | 0.21 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 4 | 0.21 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 4 | 0.21 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 4 | 0.21 |
| (1,806) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:73:ILE:HG12 | 16 | 0.21 |
| (1,783) | 1:A:68:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 1 | 0.21 |
| (1,783) | 1:A:68:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 1 | 0.21 |
| (1,783) | 1:A:68:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 1 | 0.21 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 2 | 0.21 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 2 | 0.21 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 2 | 0.21 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 3 | 0.21 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 3 | 0.21 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 3 | 0.21 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 15 | 0.21 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 15 | 0.21 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 15 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB1 | 4 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB2 | 4 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB3 | 4 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB1 | 4 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB2 | 4 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB3 | 4 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB1 | 4 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB2 | 4 | 0.21 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB3 | 4 | 0.21 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 2 | 0.21 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 3 | 0.21 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 8 | 0.21 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 12 | 0.21 |
| (1,690) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HA | 11 | 0.21 |
| (1,690) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HA | 20 | 0.21 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG21 | 1:A:63:PHE:H | 15 | 0.21 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG22 | 1:A:63:PHE:H | 15 | 0.21 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG23 | 1:A:63:PHE:H | 15 | 0.21 |
| (1,655) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 12 | 0.21 |
| (1,653) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HG | 20 | 0.21 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB1 | 1:A:59:SER:HA | 11 | 0.21 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB2 | 1:A:59:SER:HA | 11 | 0.21 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB3 | 1:A:59:SER:HA | 11 | 0.21 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB1 | 1:A:59:SER:HA | 18 | 0.21 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB2 | 1:A:59:SER:HA | 18 | 0.21 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB3 | 1:A:59:SER:HA | 18 | 0.21 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB1 | 1:A:59:SER:HA | 19 | 0.21 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB2 | 1:A:59:SER:HA | 19 | 0.21 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB3 | 1:A:59:SER:HA | 19 | 0.21 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD11 | 17 | 0.21 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD12 | 17 | 0.21 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD13 | 17 | 0.21 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 1 | 0.21 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 1 | 0.21 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 1 | 0.21 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:HA | 5 | 0.21 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:HA | 5 | 0.21 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:HA | 5 | 0.21 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:HA | 14 | 0.21 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:HA | 14 | 0.21 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:HA | 14 | 0.21 |
| (1,625) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HB3 | 7 | 0.21 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD11 | 10 | 0.21 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD12 | 10 | 0.21 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD13 | 10 | 0.21 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD11 | 10 | 0.21 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD12 | 10 | 0.21 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD13 | 10 | 0.21 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD11 | 10 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD12 | 10 | 0.21 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD13 | 10 | 0.21 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 18 | 0.21 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 18 | 0.21 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 18 | 0.21 |
| (1,565) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:51:ALA:H | 9 | 0.21 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:24:ALA:H | 2 | 0.21 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:24:ALA:H | 2 | 0.21 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:24:ALA:H | 2 | 0.21 |
| (1,536) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:60:CYS:H | 14 | 0.21 |
| (1,536) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:60:CYS:H | 19 | 0.21 |
| (1,513) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:H | 1 | 0.21 |
| (1,513) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:H | 13 | 0.21 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 14 | 0.21 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 2 | 0.21 |
| (1,454) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:H | 6 | 0.21 |
| (1,445) | 1:A:53:THR:H | 1:A:61:PRO:HA | 3 | 0.21 |
| (1,405) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:65:ARG:HA | 13 | 0.21 |
| (1,398) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:24:ALA:H | 1 | 0.21 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 2 | 0.21 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 2 | 0.21 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 2 | 0.21 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 15 | 0.21 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 15 | 0.21 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 15 | 0.21 |
| (1,360) | 1:A:57:CYS:HB2 | 1:A:60:CYS:H | 2 | 0.21 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 5 | 0.21 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 16 | 0.21 |
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 1 | 0.21 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 17 | 0.21 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 6 | 0.21 |
| (1,254) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 4 | 0.21 |
| (1,254) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 8 | 0.21 |
| (1,243) | 1:A:37:GLU:HB2 | 1:A:39:TYR:H | 20 | 0.21 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:72:ALA:H | 3 | 0.21 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:72:ALA:H | 3 | 0.21 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:72:ALA:H | 3 | 0.21 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 14 | 0.21 |
| (1,203) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:H | 8 | 0.21 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 13 | 0.21 |
| (1,184) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HB2 | 11 | 0.21 |
| (1,180) | 1:A:88:PRO:HB2 | 1:A:89:HIS:H | 9 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,178) | 1:A:23:GLU:H | 1:A:26:ARG:HG3 | 12 | 0.21 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG2 | 1 | 0.21 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG3 | 1 | 0.21 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG2 | 1 | 0.21 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG3 | 1 | 0.21 |
| (1,1718) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HA | 4 | 0.21 |
| (1,1718) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HA | 4 | 0.21 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG2 | 1:A:89:HIS:H | 20 | 0.21 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG3 | 1:A:89:HIS:H | 20 | 0.21 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG2 | 14 | 0.21 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG3 | 14 | 0.21 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG2 | 14 | 0.21 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG3 | 14 | 0.21 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG2 | 16 | 0.21 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG3 | 16 | 0.21 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG2 | 16 | 0.21 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG3 | 16 | 0.21 |
| (1,1709) | 1:A:86:CYS:HA | 1:A:87:ASP:HB2 | 5 | 0.21 |
| (1,1709) | 1:A:86:CYS:HA | 1:A:87:ASP:HB3 | 5 | 0.21 |
| (1,1700) | 1:A:84:LYS:HD2 | 1:A:85:LEU:H | 7 | 0.21 |
| (1,1700) | 1:A:84:LYS:HD3 | 1:A:85:LEU:H | 7 | 0.21 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 3 | 0.21 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 3 | 0.21 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 5 | 0.21 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 5 | 0.21 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 13 | 0.21 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 13 | 0.21 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 16 | 0.21 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 16 | 0.21 |
| (1,168) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 5 | 0.21 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB1 | 3 | 0.21 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB2 | 3 | 0.21 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB3 | 3 | 0.21 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:66:MET:H | 15 | 0.21 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:MET:H | 15 | 0.21 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:HB2 | 16 | 0.21 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:HB2 | 16 | 0.21 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:HB2 | 16 | 0.21 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HB2 | 16 | 0.21 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HB2 | 16 | 0.21 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HB2 | 16 | 0.21 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 1 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 1 | 0.21 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 1 | 0.21 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 1 | 0.21 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 1 | 0.21 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 1 | 0.21 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB2 | 19 | 0.21 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB3 | 19 | 0.21 |
| (1,1517) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:33:LYS:HE2 | 17 | 0.21 |
| (1,1517) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:33:LYS:HE3 | 17 | 0.21 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE2 | 12 | 0.21 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE3 | 12 | 0.21 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE2 | 15 | 0.21 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE3 | 15 | 0.21 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE2 | 16 | 0.21 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE3 | 16 | 0.21 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD2 | 9 | 0.21 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD3 | 9 | 0.21 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD2 | 9 | 0.21 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD3 | 9 | 0.21 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD2 | 13 | 0.21 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD3 | 13 | 0.21 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD2 | 13 | 0.21 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD3 | 13 | 0.21 |
| (1,1440) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:HA | 10 | 0.21 |
| (1,1440) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:HA | 10 | 0.21 |
| (1,1440) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:HA | 20 | 0.21 |
| (1,1440) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:HA | 20 | 0.21 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB1 | 20 | 0.21 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB2 | 20 | 0.21 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB3 | 20 | 0.21 |
| (1,1416) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:14:SER:HA | 8 | 0.21 |
| (1,1416) | 1:A:13:LYS:HB3 | 1:A:14:SER:HA | 8 | 0.21 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB2 | 7 | 0.21 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB3 | 7 | 0.21 |
| (1,1401) | 1:A:10:CYS:HB2 | 1:A:11:TYR:H | 3 | 0.21 |
| (1,1401) | 1:A:10:CYS:HB3 | 1:A:11:TYR:H | 3 | 0.21 |
| (1,1388) | 1:A:6:LYS:HB2 | 1:A:7:LEU:H | 11 | 0.21 |
| (1,1388) | 1:A:6:LYS:HB3 | 1:A:7:LEU:H | 11 | 0.21 |
| (1,1358) | 1:A:84:LYS:H | 1:A:84:LYS:HG2 | 14 | 0.21 |
| (1,1340) | 1:A:84:LYS:HG3 | 1:A:85:LEU:H | 16 | 0.21 |
| (1,1340) | 1:A:84:LYS:HG3 | 1:A:85:LEU:H | 19 | 0.21 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG21 | 14 | 0.21 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG22 | 14 | 0.21 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG23 | 14 | 0.21 |
| (1,1286) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:H | 20 | 0.21 |
| (1,1281) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:43:LEU:H | 8 | 0.21 |
| (1,1202) | 1:A:76:LEU:HG | 1:A:77:GLU:H | 2 | 0.21 |
| (1,1202) | 1:A:76:LEU:HG | 1:A:77:GLU:H | 12 | 0.21 |
| (1,1186) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HA | 3 | 0.21 |
| (1,1186) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HA | 18 | 0.21 |
| (1,1171) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:H | 6 | 0.21 |
| (1,1171) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:H | 19 | 0.21 |
| (1,1111) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HA | 7 | 0.21 |
| (1,1088) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG2 | 4 | 0.21 |
| (1,1081) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HA | 17 | 0.21 |
| (1,1047) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HA | 4 | 0.21 |
| (1,1040) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HD3 | 15 | 0.21 |
| (1,1017) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:57:CYS:HB2 | 7 | 0.21 |
| (1,1017) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:57:CYS:HB2 | 18 | 0.21 |
| (1,1008) | 1:A:34:HIS:HB3 | 1:A:35:LEU:HA | 4 | 0.21 |
| (1,1007) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 10 | 0.21 |
| (1,1000) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 9 | 0.21 |
| (1,997) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HB3 | 6 | 0.2 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 15 | 0.2 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 15 | 0.2 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 15 | 0.2 |
| (1,978) | 1:A:86:CYS:HB2 | 1:A:87:ASP:HA | 17 | 0.2 |
| (1,958) | 1:A:69:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 16 | 0.2 |
| (1,958) | 1:A:69:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 19 | 0.2 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 2 | 0.2 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 2 | 0.2 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 2 | 0.2 |
| (1,910) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG3 | 14 | 0.2 |
| (1,884) | 1:A:77:GLU:HG2 | 1:A:78:LEU:HA | 17 | 0.2 |
| (1,854) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HB3 | 9 | 0.2 |
| (1,854) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HB3 | 13 | 0.2 |
| (1,826) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HA | 10 | 0.2 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 18 | 0.2 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 18 | 0.2 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 18 | 0.2 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD11 | 19 | 0.2 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD12 | 19 | 0.2 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD13 | 19 | 0.2 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB1 | 9 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB2 | 9 | 0.2 |
| (1,807) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HB3 | 9 | 0.2 |
| (1,806) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:73:ILE:HG12 | 1 | 0.2 |
| (1,806) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:73:ILE:HG12 | 2 | 0.2 |
| (1,806) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:73:ILE:HG12 | 3 | 0.2 |
| (1,806) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:73:ILE:HG12 | 5 | 0.2 |
| (1,806) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:73:ILE:HG12 | 6 | 0.2 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG21 | 9 | 0.2 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG22 | 9 | 0.2 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG23 | 9 | 0.2 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB1 | 1:A:78:LEU:HB2 | 17 | 0.2 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB2 | 1:A:78:LEU:HB2 | 17 | 0.2 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB3 | 1:A:78:LEU:HB2 | 17 | 0.2 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 12 | 0.2 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 12 | 0.2 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 12 | 0.2 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB1 | 19 | 0.2 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB2 | 19 | 0.2 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB3 | 19 | 0.2 |
| (1,739) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 1 | 0.2 |
| (1,739) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 1 | 0.2 |
| (1,739) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 1 | 0.2 |
| (1,724) | 1:A:85:LEU:HG | 1:A:86:CYS:HA | 7 | 0.2 |
| (1,724) | 1:A:85:LEU:HG | 1:A:86:CYS:HA | 19 | 0.2 |
| (1,717) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HG13 | 16 | 0.2 |
| (1,717) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HG13 | 20 | 0.2 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HA | 10 | 0.2 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HA | 10 | 0.2 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HA | 10 | 0.2 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HA | 15 | 0.2 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HA | 15 | 0.2 |
| (1,716) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HA | 15 | 0.2 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 20 | 0.2 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 20 | 0.2 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 20 | 0.2 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 6 | 0.2 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 15 | 0.2 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 20 | 0.2 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 14 | 0.2 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 14 | 0.2 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 14 | 0.2 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG21 | 1:A:63:PHE:H | 3 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG22 | 1:A:63:PHE:H | 3 | 0.2 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG23 | 1:A:63:PHE:H | 3 | 0.2 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG21 | 1:A:63:PHE:H | 19 | 0.2 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG22 | 1:A:63:PHE:H | 19 | 0.2 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG23 | 1:A:63:PHE:H | 19 | 0.2 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD11 | 9 | 0.2 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD12 | 9 | 0.2 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD13 | 9 | 0.2 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:HA | 3 | 0.2 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:HA | 3 | 0.2 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:HA | 3 | 0.2 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:HA | 11 | 0.2 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:HA | 11 | 0.2 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:HA | 11 | 0.2 |
| (1,625) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HB3 | 17 | 0.2 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD21 | 5 | 0.2 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD22 | 5 | 0.2 |
| (1,606) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:78:LEU:HD23 | 5 | 0.2 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:25:SER:H | 9 | 0.2 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:25:SER:H | 9 | 0.2 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:25:SER:H | 9 | 0.2 |
| (1,565) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:51:ALA:H | 20 | 0.2 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:24:ALA:H | 7 | 0.2 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:24:ALA:H | 7 | 0.2 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:24:ALA:H | 7 | 0.2 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:24:ALA:H | 10 | 0.2 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:24:ALA:H | 10 | 0.2 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:24:ALA:H | 10 | 0.2 |
| (1,53) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:22:ILE:HD11 | 19 | 0.2 |
| (1,53) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:22:ILE:HD12 | 19 | 0.2 |
| (1,53) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:22:ILE:HD13 | 19 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:H | 15 | 0.2 |
| (1,513) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:H | 17 | 0.2 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 18 | 0.2 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 1 | 0.2 |
| (1,462) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:82:ASN:H | 4 | 0.2 |
| (1,443) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:21:ASP:H | 18 | 0.2 |
| (1,435) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:19:SER:H | 17 | 0.2 |
| (1,416) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:HA | 13 | 0.2 |
| (1,405) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:65:ARG:HA | 19 | 0.2 |
| (1,398) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:24:ALA:H | 20 | 0.2 |
| (1,391) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:88:PRO:HD3 | 3 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 16 | 0.2 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 16 | 0.2 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 16 | 0.2 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:83:ALA:H | 14 | 0.2 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:83:ALA:H | 14 | 0.2 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:83:ALA:H | 14 | 0.2 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 3 | 0.2 |
| (1,328) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:49:ASN:HB2 | 9 | 0.2 |
| (1,328) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:49:ASN:HB2 | 18 | 0.2 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 20 | 0.2 |
| (1,319) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:86:CYS:HB2 | 17 | 0.2 |
| (1,310) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:75:ALA:H | 15 | 0.2 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:H | 2 | 0.2 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:H | 2 | 0.2 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:H | 2 | 0.2 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:H | 7 | 0.2 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:H | 7 | 0.2 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:H | 7 | 0.2 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:H | 10 | 0.2 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:H | 10 | 0.2 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:H | 10 | 0.2 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:H | 12 | 0.2 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:H | 12 | 0.2 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:H | 12 | 0.2 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 2 | 0.2 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 11 | 0.2 |
| (1,260) | 1:A:61:PRO:HB2 | 1:A:63:PHE:H | 13 | 0.2 |
| (1,254) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 7 | 0.2 |
| (1,254) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 16 | 0.2 |
| (1,254) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 19 | 0.2 |
| (1,254) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 20 | 0.2 |
| (1,225) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:H | 16 | 0.2 |
| (1,210) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 5 | 0.2 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 4 | 0.2 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 13 | 0.2 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 16 | 0.2 |
| (1,203) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:H | 3 | 0.2 |
| (1,203) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:H | 11 | 0.2 |
| (1,203) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:H | 13 | 0.2 |
| (1,189) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:H | 8 | 0.2 |
| (1,189) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:H | 17 | 0.2 |
| (1,1709) | 1:A:86:CYS:HA | 1:A:87:ASP:HB2 | 19 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1709) | 1:A:86:CYS:HA | 1:A:87:ASP:HB3 | 19 | 0.2 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE2 | 1:A:85:LEU:H | 8 | 0.2 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE3 | 1:A:85:LEU:H | 8 | 0.2 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE2 | 1:A:85:LEU:H | 15 | 0.2 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE3 | 1:A:85:LEU:H | 15 | 0.2 |
| (1,1696) | 1:A:84:LYS:H | 1:A:84:LYS:HD2 | 14 | 0.2 |
| (1,1696) | 1:A:84:LYS:H | 1:A:84:LYS:HD3 | 14 | 0.2 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 8 | 0.2 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 8 | 0.2 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 12 | 0.2 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 12 | 0.2 |
| (1,168) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 1 | 0.2 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB1 | 6 | 0.2 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB2 | 6 | 0.2 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB3 | 6 | 0.2 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB1 | 20 | 0.2 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB2 | 20 | 0.2 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB3 | 20 | 0.2 |
| (1,1644) | 1:A:67:ASP:HB2 | 1:A:68:ASN:H | 6 | 0.2 |
| (1,1644) | 1:A:67:ASP:HB3 | 1:A:68:ASN:H | 6 | 0.2 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:66:MET:H | 5 | 0.2 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:MET:H | 5 | 0.2 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB2 | 1:A:62:THR:H | 6 | 0.2 |
| (1,1625) | 1:A:60:CYS:HB3 | 1:A:62:THR:H | 6 | 0.2 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 7 | 0.2 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 7 | 0.2 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 7 | 0.2 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 7 | 0.2 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 7 | 0.2 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 7 | 0.2 |
| (1,1614) | 1:A:55:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:HD11 | 11 | 0.2 |
| (1,1614) | 1:A:55:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:HD12 | 11 | 0.2 |
| (1,1614) | 1:A:55:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:HD13 | 11 | 0.2 |
| (1,1614) | 1:A:55:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:HD21 | 11 | 0.2 |
| (1,1614) | 1:A:55:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:HD22 | 11 | 0.2 |
| (1,1614) | 1:A:55:GLU:HB2 | 1:A:64:LEU:HD23 | 11 | 0.2 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB2 | 10 | 0.2 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB3 | 10 | 0.2 |
| (1,1541) | 1:A:35:LEU:HD11 | 1:A:82:ASN:HD22 | 4 | 0.2 |
| (1,1541) | 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:82:ASN:HD22 | 4 | 0.2 |
| (1,1541) | 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:82:ASN:HD22 | 4 | 0.2 |
| (1,1541) | 1:A:35:LEU:HD21 | 1:A:82:ASN:HD22 | 4 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1541) | 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:82:ASN:HD22 | 4 | 0.2 |
| (1,1541) | 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:82:ASN:HD22 | 4 | 0.2 |
| (1,1525) | 1:A:34:HIS:HA | 1:A:37:GLU:HG2 | 17 | 0.2 |
| (1,1525) | 1:A:34:HIS:HA | 1:A:37:GLU:HG3 | 17 | 0.2 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 2 | 0.2 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 2 | 0.2 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD11 | 16 | 0.2 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 16 | 0.2 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD13 | 16 | 0.2 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD21 | 16 | 0.2 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD22 | 16 | 0.2 |
| (1,1508) | 1:A:31:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD23 | 16 | 0.2 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE2 | 13 | 0.2 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE3 | 13 | 0.2 |
| (1,1495) | 1:A:28:LYS:H | 1:A:28:LYS:HG2 | 5 | 0.2 |
| (1,1495) | 1:A:28:LYS:H | 1:A:28:LYS:HG3 | 5 | 0.2 |
| (1,1492) | 1:A:26:ARG:HD2 | 1:A:27:MET:HA | 16 | 0.2 |
| (1,1492) | 1:A:26:ARG:HD3 | 1:A:27:MET:HA | 16 | 0.2 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:27:MET:H | 12 | 0.2 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:27:MET:H | 12 | 0.2 |
| (1,1462) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:22:ILE:HB | 13 | 0.2 |
| (1,1462) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:22:ILE:HB | 13 | 0.2 |
| (1,1445) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HG12 | 15 | 0.2 |
| (1,1445) | 1:A:19:SER:HA | 1:A:22:ILE:HG13 | 15 | 0.2 |
| (1,1440) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:HA | 5 | 0.2 |
| (1,1440) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:HA | 5 | 0.2 |
| (1,1438) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:18:GLN:HE21 | 18 | 0.2 |
| (1,1438) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:18:GLN:HE22 | 18 | 0.2 |
| (1,1431) | 1:A:16:GLU:HB2 | 1:A:17:PRO:HD2 | 4 | 0.2 |
| (1,1431) | 1:A:16:GLU:HB2 | 1:A:17:PRO:HD3 | 4 | 0.2 |
| (1,1431) | 1:A:16:GLU:HB3 | 1:A:17:PRO:HD2 | 4 | 0.2 |
| (1,1431) | 1:A:16:GLU:HB3 | 1:A:17:PRO:HD3 | 4 | 0.2 |
| (1,1415) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:14:SER:H | 1 | 0.2 |
| (1,1415) | 1:A:13:LYS:HB3 | 1:A:14:SER:H | 1 | 0.2 |
| (1,1415) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:14:SER:H | 15 | 0.2 |
| (1,1415) | 1:A:13:LYS:HB3 | 1:A:14:SER:H | 15 | 0.2 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB2 | 7 | 0.2 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB3 | 7 | 0.2 |
| (1,1402) | 1:A:10:CYS:HB2 | 1:A:11:TYR:HA | 12 | 0.2 |
| (1,1402) | 1:A:10:CYS:HB3 | 1:A:11:TYR:HA | 12 | 0.2 |
| (1,1399) | 1:A:9:GLN:HA | 1:A:9:GLN:HE21 | 8 | 0.2 |
| (1,1399) | 1:A:9:GLN:HA | 1:A:9:GLN:HE22 | 8 | 0.2 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG2 | 1:A:7:LEU:H | 15 | 0.2 |
| (1,1390) | 1:A:6:LYS:HG3 | 1:A:7:LEU:H | 15 | 0.2 |
| (1,1340) | 1:A:84:LYS:HG3 | 1:A:85:LEU:H | 13 | 0.2 |
| (1,1299) | 1:A:4:MET:HE1 | 1:A:6:LYS:H | 18 | 0.2 |
| (1,1299) | 1:A:4:MET:HE2 | 1:A:6:LYS:H | 18 | 0.2 |
| (1,1299) | 1:A:4:MET:HE3 | 1:A:6:LYS:H | 18 | 0.2 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:76:LEU:H | 5 | 0.2 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:76:LEU:H | 5 | 0.2 |
| (1,129) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:76:LEU:H | 5 | 0.2 |
| (1,1233) | 1:A:56:PHE:HD1 | 1:A:83:ALA:HA | 17 | 0.2 |
| (1,1220) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:81:ILE:H | 17 | 0.2 |
| (1,1202) | 1:A:76:LEU:HG | 1:A:77:GLU:H | 3 | 0.2 |
| (1,1202) | 1:A:76:LEU:HG | 1:A:77:GLU:H | 20 | 0.2 |
| (1,1197) | 1:A:12:TRP:HD1 | 1:A:13:LYS:HA | 9 | 0.2 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HD1 | 9 | 0.2 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HD1 | 9 | 0.2 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HD1 | 9 | 0.2 |
| (1,1187) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:78:LEU:HG | 5 | 0.2 |
| (1,1186) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HA | 6 | 0.2 |
| (1,1171) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:H | 15 | 0.2 |
| (1,1111) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HA | 8 | 0.2 |
| (1,1111) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HA | 12 | 0.2 |
| (1,1100) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:58:ALA:HA | 6 | 0.2 |
| (1,1080) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:74:LYS:HE3 | 10 | 0.2 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 15 | 0.2 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 15 | 0.2 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 15 | 0.2 |
| (1,1047) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HA | 12 | 0.2 |
| (1,1047) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HA | 13 | 0.2 |
| (1,1040) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HD3 | 9 | 0.2 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:75:ALA:HA | 7 | 0.2 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:75:ALA:HA | 7 | 0.2 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:75:ALA:HA | 7 | 0.2 |
| (1,1008) | 1:A:34:HIS:HB3 | 1:A:35:LEU:HA | 8 | 0.2 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 6 | 0.19 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 6 | 0.19 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 6 | 0.19 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 9 | 0.19 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 9 | 0.19 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 9 | 0.19 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 14 | 0.19 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 14 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 14 | 0.19 |
| (1,958) | 1:A:69:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 7 | 0.19 |
| (1,958) | 1:A:69:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 12 | 0.19 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HG2 | 1 | 0.19 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 1 | 0.19 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HG2 | 1 | 0.19 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HG2 | 2 | 0.19 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 2 | 0.19 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HG2 | 2 | 0.19 |
| (1,947) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HG3 | 3 | 0.19 |
| (1,947) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HG3 | 4 | 0.19 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 9 | 0.19 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 9 | 0.19 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 9 | 0.19 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 13 | 0.19 |
| (1,900) | 1:A:87:ASP:HA | 1:A:88:PRO:HB3 | 13 | 0.19 |
| (1,900) | 1:A:87:ASP:HA | 1:A:88:PRO:HB3 | 19 | 0.19 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG21 | 16 | 0.19 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG22 | 16 | 0.19 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG23 | 16 | 0.19 |
| (1,854) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HB3 | 12 | 0.19 |
| (1,840) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:HA | 18 | 0.19 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 15 | 0.19 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 15 | 0.19 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 15 | 0.19 |
| (1,806) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:73:ILE:HG12 | 4 | 0.19 |
| (1,806) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:73:ILE:HG12 | 8 | 0.19 |
| (1,806) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:73:ILE:HG12 | 11 | 0.19 |
| (1,806) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:73:ILE:HG12 | 13 | 0.19 |
| (1,806) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:73:ILE:HG12 | 18 | 0.19 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB1 | 1:A:78:LEU:HB2 | 15 | 0.19 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB2 | 1:A:78:LEU:HB2 | 15 | 0.19 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB3 | 1:A:78:LEU:HB2 | 15 | 0.19 |
| (1,791) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 9 | 0.19 |
| (1,791) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 17 | 0.19 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 10 | 0.19 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 10 | 0.19 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 10 | 0.19 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 10 | 0.19 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 10 | 0.19 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 10 | 0.19 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 10 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 10 | 0.19 |
| (1,785) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 10 | 0.19 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE1 | 1:A:7:LEU:HG | 16 | 0.19 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE2 | 1:A:7:LEU:HG | 16 | 0.19 |
| (1,776) | 1:A:4:MET:HE3 | 1:A:7:LEU:HG | 16 | 0.19 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 10 | 0.19 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 10 | 0.19 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 10 | 0.19 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 11 | 0.19 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 11 | 0.19 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 11 | 0.19 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 20 | 0.19 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 20 | 0.19 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 20 | 0.19 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB1 | 3 | 0.19 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB2 | 3 | 0.19 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB3 | 3 | 0.19 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB1 | 9 | 0.19 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB2 | 9 | 0.19 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB3 | 9 | 0.19 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB1 | 11 | 0.19 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB2 | 11 | 0.19 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB3 | 11 | 0.19 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 19 | 0.19 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 19 | 0.19 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 19 | 0.19 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG21 | 14 | 0.19 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG22 | 14 | 0.19 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG23 | 14 | 0.19 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 5 | 0.19 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 14 | 0.19 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 18 | 0.19 |
| (1,690) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HA | 14 | 0.19 |
| (1,690) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HA | 19 | 0.19 |
| (1,671) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:22:ILE:HD11 | 1 | 0.19 |
| (1,671) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:22:ILE:HD12 | 1 | 0.19 |
| (1,671) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:22:ILE:HD13 | 1 | 0.19 |
| (1,655) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 13 | 0.19 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB1 | 1:A:59:SER:HA | 16 | 0.19 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB2 | 1:A:59:SER:HA | 16 | 0.19 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB3 | 1:A:59:SER:HA | 16 | 0.19 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD11 | 10 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD12 | 10 | 0.19 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD13 | 10 | 0.19 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:HA | 15 | 0.19 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:HA | 15 | 0.19 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:HA | 15 | 0.19 |
| (1,625) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HB3 | 15 | 0.19 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD11 | 19 | 0.19 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD12 | 19 | 0.19 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD13 | 19 | 0.19 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD11 | 19 | 0.19 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD12 | 19 | 0.19 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD13 | 19 | 0.19 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD11 | 19 | 0.19 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD12 | 19 | 0.19 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD13 | 19 | 0.19 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD11 | 19 | 0.19 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD12 | 19 | 0.19 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD13 | 19 | 0.19 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD11 | 9 | 0.19 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD12 | 9 | 0.19 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD13 | 9 | 0.19 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD11 | 18 | 0.19 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD12 | 18 | 0.19 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD13 | 18 | 0.19 |
| (1,544) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:16:GLU:H | 5 | 0.19 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:24:ALA:H | 8 | 0.19 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:24:ALA:H | 8 | 0.19 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:24:ALA:H | 8 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:H | 14 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:H | 16 | 0.19 |
| (1,513) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:H | 19 | 0.19 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 4 | 0.19 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 11 | 0.19 |
| (1,487) | 1:A:42:GLN:HE21 | 1:A:58:ALA:H | 9 | 0.19 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 1 | 0.19 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 16 | 0.19 |
| (1,478) | 1:A:11:TYR:H | 1:A:11:TYR:HD1 | 5 | 0.19 |
| (1,447) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:18:GLN:H | 16 | 0.19 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 9 | 0.19 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 9 | 0.19 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 9 | 0.19 |
| (1,435) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:19:SER:H | 15 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,424) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:13:LYS:HA | 3 | 0.19 |
| (1,424) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:13:LYS:HA | 8 | 0.19 |
| (1,420) | 1:A:48:GLY:HA3 | 1:A:89:HIS:H | 13 | 0.19 |
| (1,41) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:78:LEU:HG | 16 | 0.19 |
| (1,398) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:24:ALA:H | 15 | 0.19 |
| (1,396) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:45:GLU:H | 16 | 0.19 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 20 | 0.19 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 20 | 0.19 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 20 | 0.19 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 14 | 0.19 |
| (1,328) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:49:ASN:HB2 | 14 | 0.19 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 5 | 0.19 |
| (1,310) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:75:ALA:H | 14 | 0.19 |
| (1,300) | 1:A:63:PHE:H | 1:A:63:PHE:HB3 | 5 | 0.19 |
| (1,300) | 1:A:63:PHE:H | 1:A:63:PHE:HB3 | 7 | 0.19 |
| (1,243) | 1:A:37:GLU:HB2 | 1:A:39:TYR:H | 15 | 0.19 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 4 | 0.19 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:H | 5 | 0.19 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:H | 5 | 0.19 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:H | 5 | 0.19 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:H | 9 | 0.19 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:H | 9 | 0.19 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:H | 9 | 0.19 |
| (1,229) | 1:A:26:ARG:H | 1:A:27:MET:HB3 | 16 | 0.19 |
| (1,226) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:77:GLU:HB3 | 20 | 0.19 |
| (1,223) | 1:A:74:LYS:HB2 | 1:A:75:ALA:H | 5 | 0.19 |
| (1,214) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:63:PHE:H | 2 | 0.19 |
| (1,212) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:67:ASP:H | 6 | 0.19 |
| (1,189) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:H | 7 | 0.19 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG2 | 20 | 0.19 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG3 | 20 | 0.19 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG2 | 20 | 0.19 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG3 | 20 | 0.19 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE2 | 1:A:85:LEU:H | 13 | 0.19 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE3 | 1:A:85:LEU:H | 13 | 0.19 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE2 | 1:A:85:LEU:H | 20 | 0.19 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE3 | 1:A:85:LEU:H | 20 | 0.19 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 7 | 0.19 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 7 | 0.19 |
| (1,1682) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 19 | 0.19 |
| (1,1682) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 19 | 0.19 |
| (1,168) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 11 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,168) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 19 | 0.19 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD11 | 1:A:80:LYS:H | 19 | 0.19 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD12 | 1:A:80:LYS:H | 19 | 0.19 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD13 | 1:A:80:LYS:H | 19 | 0.19 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD21 | 1:A:80:LYS:H | 19 | 0.19 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD22 | 1:A:80:LYS:H | 19 | 0.19 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD23 | 1:A:80:LYS:H | 19 | 0.19 |
| (1,1645) | 1:A:67:ASP:HB2 | 1:A:68:ASN:HA | 12 | 0.19 |
| (1,1645) | 1:A:67:ASP:HB3 | 1:A:68:ASN:HA | 12 | 0.19 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:66:MET:H | 8 | 0.19 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:MET:H | 8 | 0.19 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 3 | 0.19 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 3 | 0.19 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 3 | 0.19 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 3 | 0.19 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 3 | 0.19 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 3 | 0.19 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 12 | 0.19 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 12 | 0.19 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 12 | 0.19 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 12 | 0.19 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 12 | 0.19 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 12 | 0.19 |
| (1,1617) | 1:A:56:PHE:H | 1:A:64:LEU:HD11 | 8 | 0.19 |
| (1,1617) | 1:A:56:PHE:H | 1:A:64:LEU:HD12 | 8 | 0.19 |
| (1,1617) | 1:A:56:PHE:H | 1:A:64:LEU:HD13 | 8 | 0.19 |
| (1,1617) | 1:A:56:PHE:H | 1:A:64:LEU:HD21 | 8 | 0.19 |
| (1,1617) | 1:A:56:PHE:H | 1:A:64:LEU:HD22 | 8 | 0.19 |
| (1,1617) | 1:A:56:PHE:H | 1:A:64:LEU:HD23 | 8 | 0.19 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 6 | 0.19 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 6 | 0.19 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 11 | 0.19 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 11 | 0.19 |
| (1,1485) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HE2 | 20 | 0.19 |
| (1,1485) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HE3 | 20 | 0.19 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:27:MET:H | 11 | 0.19 |
| (1,1478) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:27:MET:H | 11 | 0.19 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD2 | 10 | 0.19 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD3 | 10 | 0.19 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD2 | 10 | 0.19 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD3 | 10 | 0.19 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB1 | 4 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB2 | 4 | 0.19 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB3 | 4 | 0.19 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB1 | 16 | 0.19 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB2 | 16 | 0.19 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB3 | 16 | 0.19 |
| (1,1418) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:14:SER:H | 1 | 0.19 |
| (1,1418) | 1:A:13:LYS:HG3 | 1:A:14:SER:H | 1 | 0.19 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB2 | 15 | 0.19 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB3 | 15 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD11 | 4 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD12 | 4 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD13 | 4 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD21 | 4 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD22 | 4 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD23 | 4 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD11 | 6 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD12 | 6 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD13 | 6 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD21 | 6 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD22 | 6 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD23 | 6 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD11 | 18 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD12 | 18 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD13 | 18 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD21 | 18 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD22 | 18 | 0.19 |
| (1,1393) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD23 | 18 | 0.19 |
| (1,1340) | 1:A:84:LYS:HG3 | 1:A:85:LEU:H | 7 | 0.19 |
| (1,1281) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:43:LEU:H | 5 | 0.19 |
| (1,1281) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:43:LEU:H | 19 | 0.19 |
| (1,1229) | 1:A:55:GLU:HG2 | 1:A:56:PHE:HD1 | 12 | 0.19 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 14 | 0.19 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HD1 | 10 | 0.19 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HD1 | 10 | 0.19 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HD1 | 10 | 0.19 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HD1 | 12 | 0.19 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HD1 | 12 | 0.19 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HD1 | 12 | 0.19 |
| (1,1186) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HA | 4 | 0.19 |
| (1,1171) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:H | 1 | 0.19 |
| (1,1163) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:79:TYR:HE2 | 10 | 0.19 |
| (1,1151) | 1:A:11:TYR:HA | 1:A:11:TYR:HE1 | 20 | 0.19 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1124) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:22:ILE:HB | 18 | 0.19 |
| (1,1111) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HA | 17 | 0.19 |
| (1,1088) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG2 | 6 | 0.19 |
| (1,1085) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HA | 8 | 0.19 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 2 | 0.19 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 2 | 0.19 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 2 | 0.19 |
| (1,106) | 1:A:84:LYS:H | 1:A:84:LYS:HG3 | 14 | 0.19 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:75:ALA:HA | 14 | 0.19 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:75:ALA:HA | 14 | 0.19 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:75:ALA:HA | 14 | 0.19 |
| (1,1017) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:57:CYS:HB2 | 15 | 0.19 |
| (1,1017) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:57:CYS:HB2 | 16 | 0.19 |
| (1,1011) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 5 | 0.19 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG21 | 16 | 0.18 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG22 | 16 | 0.18 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG23 | 16 | 0.18 |
| (1,98) | 1:A:55:GLU:HG3 | 1:A:56:PHE:H | 20 | 0.18 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB1 | 6 | 0.18 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB2 | 6 | 0.18 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB3 | 6 | 0.18 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB1 | 17 | 0.18 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB2 | 17 | 0.18 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB3 | 17 | 0.18 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HG2 | 10 | 0.18 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 10 | 0.18 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HG2 | 10 | 0.18 |
| (1,947) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HG3 | 13 | 0.18 |
| (1,93) | 1:A:85:LEU:HG | 1:A:86:CYS:H | 14 | 0.18 |
| (1,93) | 1:A:85:LEU:HG | 1:A:86:CYS:H | 15 | 0.18 |
| (1,93) | 1:A:85:LEU:HG | 1:A:86:CYS:H | 20 | 0.18 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 5 | 0.18 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 5 | 0.18 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 5 | 0.18 |
| (1,910) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG3 | 5 | 0.18 |
| (1,910) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG3 | 13 | 0.18 |
| (1,854) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HB3 | 2 | 0.18 |
| (1,840) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:HA | 14 | 0.18 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 6 | 0.18 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 6 | 0.18 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 6 | 0.18 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 16 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 16 | 0.18 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 16 | 0.18 |
| (1,827) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HG2 | 17 | 0.18 |
| (1,826) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HA | 17 | 0.18 |
| (1,824) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HB3 | 2 | 0.18 |
| (1,824) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HB3 | 20 | 0.18 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 5 | 0.18 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 5 | 0.18 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 5 | 0.18 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD11 | 2 | 0.18 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD12 | 2 | 0.18 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD13 | 2 | 0.18 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD11 | 20 | 0.18 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD12 | 20 | 0.18 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD13 | 20 | 0.18 |
| (1,806) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:73:ILE:HG12 | 9 | 0.18 |
| (1,806) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:73:ILE:HG12 | 12 | 0.18 |
| (1,806) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:73:ILE:HG12 | 20 | 0.18 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB1 | 1:A:78:LEU:HB2 | 1 | 0.18 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB2 | 1:A:78:LEU:HB2 | 1 | 0.18 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB3 | 1:A:78:LEU:HB2 | 1 | 0.18 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB1 | 1:A:78:LEU:HB2 | 3 | 0.18 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB2 | 1:A:78:LEU:HB2 | 3 | 0.18 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB3 | 1:A:78:LEU:HB2 | 3 | 0.18 |
| (1,769) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:24:ALA:HB1 | 14 | 0.18 |
| (1,769) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:24:ALA:HB2 | 14 | 0.18 |
| (1,769) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:24:ALA:HB3 | 14 | 0.18 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB1 | 14 | 0.18 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB2 | 14 | 0.18 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB3 | 14 | 0.18 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG21 | 8 | 0.18 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG22 | 8 | 0.18 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG23 | 8 | 0.18 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 7 | 0.18 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 11 | 0.18 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 3 | 0.18 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 3 | 0.18 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 3 | 0.18 |
| (1,655) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 10 | 0.18 |
| (1,655) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 19 | 0.18 |
| (1,653) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HG | 1 | 0.18 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB1 | 1:A:59:SER:HA | 2 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB2 | 1:A:59:SER:HA | 2 | 0.18 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB3 | 1:A:59:SER:HA | 2 | 0.18 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB1 | 1:A:59:SER:HA | 9 | 0.18 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB2 | 1:A:59:SER:HA | 9 | 0.18 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB3 | 1:A:59:SER:HA | 9 | 0.18 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB1 | 1:A:59:SER:HA | 10 | 0.18 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB2 | 1:A:59:SER:HA | 10 | 0.18 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB3 | 1:A:59:SER:HA | 10 | 0.18 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:HA | 19 | 0.18 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:HA | 19 | 0.18 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:HA | 19 | 0.18 |
| (1,625) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HB3 | 1 | 0.18 |
| (1,625) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,565) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:51:ALA:H | 2 | 0.18 |
| (1,565) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:51:ALA:H | 4 | 0.18 |
| (1,544) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:16:GLU:H | 7 | 0.18 |
| (1,536) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:60:CYS:H | 13 | 0.18 |
| (1,506) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:CYS:H | 1 | 0.18 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 8 | 0.18 |
| (1,470) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 15 | 0.18 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 9 | 0.18 |
| (1,461) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:83:ALA:H | 7 | 0.18 |
| (1,454) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:H | 11 | 0.18 |
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 4 | 0.18 |
| (1,416) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:HA | 9 | 0.18 |
| (1,400) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:75:ALA:H | 9 | 0.18 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 7 | 0.18 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 7 | 0.18 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 7 | 0.18 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 8 | 0.18 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 8 | 0.18 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 8 | 0.18 |
| (1,353) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:HIS:HB2 | 20 | 0.18 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 18 | 0.18 |
| (1,324) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:H | 18 | 0.18 |
| (1,324) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:H | 20 | 0.18 |
| (1,319) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:86:CYS:HB2 | 9 | 0.18 |
| (1,307) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:47:CYS:HB2 | 9 | 0.18 |
| (1,287) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:H | 11 | 0.18 |
| (1,243) | 1:A:37:GLU:HB2 | 1:A:39:TYR:H | 9 | 0.18 |
| (1,243) | 1:A:37:GLU:HB2 | 1:A:39:TYR:H | 11 | 0.18 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:H | 15 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:H | 15 | 0.18 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:H | 15 | 0.18 |
| (1,212) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:67:ASP:H | 9 | 0.18 |
| (1,212) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:67:ASP:H | 16 | 0.18 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 15 | 0.18 |
| (1,181) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:65:ARG:HB3 | 4 | 0.18 |
| (1,1710) | 1:A:87:ASP:H | 1:A:87:ASP:HB2 | 3 | 0.18 |
| (1,1710) | 1:A:87:ASP:H | 1:A:87:ASP:HB3 | 3 | 0.18 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 2 | 0.18 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 2 | 0.18 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 10 | 0.18 |
| (1,1687) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 10 | 0.18 |
| (1,168) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 7 | 0.18 |
| (1,168) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 13 | 0.18 |
| (1,168) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 14 | 0.18 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD11 | 1:A:80:LYS:H | 3 | 0.18 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD12 | 1:A:80:LYS:H | 3 | 0.18 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD13 | 1:A:80:LYS:H | 3 | 0.18 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD21 | 1:A:80:LYS:H | 3 | 0.18 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD22 | 1:A:80:LYS:H | 3 | 0.18 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD23 | 1:A:80:LYS:H | 3 | 0.18 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB1 | 8 | 0.18 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB2 | 8 | 0.18 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB1 | 15 | 0.18 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB2 | 15 | 0.18 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB3 | 15 | 0.18 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 14 | 0.18 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 14 | 0.18 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 14 | 0.18 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 14 | 0.18 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 14 | 0.18 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 14 | 0.18 |
| (1,1645) | 1:A:67:ASP:HB2 | 1:A:68:ASN:HA | 9 | 0.18 |
| (1,1645) | 1:A:67:ASP:HB3 | 1:A:68:ASN:HA | 9 | 0.18 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:HB2 | 2 | 0.18 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:HB2 | 2 | 0.18 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:HB2 | 2 | 0.18 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HB2 | 2 | 0.18 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HB2 | 2 | 0.18 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HB2 | 2 | 0.18 |
| (1,1620) | 1:A:59:SER:HB2 | 1:A:60:CYS:H | 2 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1620) | 1:A:59:SER:HB3 | 1:A:60:CYS:H | 2 | 0.18 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB2 | 18 | 0.18 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB3 | 18 | 0.18 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG2 | 12 | 0.18 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG3 | 12 | 0.18 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 3 | 0.18 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 3 | 0.18 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 4 | 0.18 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 4 | 0.18 |
| (1,154) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:57:CYS:H | 9 | 0.18 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE2 | 4 | 0.18 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE3 | 4 | 0.18 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE2 | 4 | 0.18 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE3 | 4 | 0.18 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD2 | 5 | 0.18 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD3 | 5 | 0.18 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD2 | 5 | 0.18 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD3 | 5 | 0.18 |
| (1,1458) | 1:A:20:ASP:HB2 | 1:A:23:GLU:HB3 | 11 | 0.18 |
| (1,1458) | 1:A:20:ASP:HB3 | 1:A:23:GLU:HB3 | 11 | 0.18 |
| (1,1450) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HB | 15 | 0.18 |
| (1,1450) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HB | 15 | 0.18 |
| (1,1439) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:H | 12 | 0.18 |
| (1,1439) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:H | 12 | 0.18 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB1 | 7 | 0.18 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB2 | 7 | 0.18 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB3 | 7 | 0.18 |
| (1,1422) | 1:A:14:SER:HB2 | 1:A:16:GLU:H | 11 | 0.18 |
| (1,1422) | 1:A:14:SER:HB3 | 1:A:16:GLU:H | 11 | 0.18 |
| (1,1414) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:14:SER:HB2 | 8 | 0.18 |
| (1,1414) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:14:SER:HB3 | 8 | 0.18 |
| (1,1410) | 1:A:13:LYS:H | 1:A:13:LYS:HE2 | 20 | 0.18 |
| (1,1410) | 1:A:13:LYS:H | 1:A:13:LYS:HE3 | 20 | 0.18 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB2 | 10 | 0.18 |
| (1,1407) | 1:A:12:TRP:HE1 | 1:A:13:LYS:HB3 | 10 | 0.18 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB2 | 12 | 0.18 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB3 | 12 | 0.18 |
| (1,1338) | 1:A:89:HIS:H | 1:A:90:PRO:HA | 5 | 0.18 |
| (1,1292) | 1:A:68:ASN:HA | 1:A:72:ALA:H | 12 | 0.18 |
| (1,1254) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:46:GLY:H | 1 | 0.18 |
| (1,1216) | 1:A:56:PHE:HD2 | 1:A:66:MET:HE1 | 3 | 0.18 |
| (1,1216) | 1:A:56:PHE:HD2 | 1:A:66:MET:HE2 | 3 | 0.18 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1216) | 1:A:56:PHE:HD2 | 1:A:66:MET:HE3 | 3 | 0.18 |
| (1,1197) | 1:A:12:TRP:HD1 | 1:A:13:LYS:HA | 13 | 0.18 |
| (1,1192) | 1:A:79:TYR:HD1 | 1:A:80:LYS:HA | 8 | 0.18 |
| (1,1192) | 1:A:79:TYR:HD1 | 1:A:80:LYS:HA | 10 | 0.18 |
| (1,1186) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HA | 2 | 0.18 |
| (1,1163) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:79:TYR:HE2 | 12 | 0.18 |
| (1,1100) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:58:ALA:HA | 7 | 0.18 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 1 | 0.18 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 1 | 0.18 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 1 | 0.18 |
| (1,1097) | 1:A:6:LYS:HA | 1:A:6:LYS:HG3 | 19 | 0.18 |
| (1,1085) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HA | 6 | 0.18 |
| (1,1085) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HA | 19 | 0.18 |
| (1,1081) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HA | 3 | 0.18 |
| (1,1081) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HA | 13 | 0.18 |
| (1,1054) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:65:ARG:HA | 8 | 0.18 |
| (1,1047) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HA | 2 | 0.18 |
| (1,1017) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:57:CYS:HB2 | 8 | 0.18 |
| (1,1008) | 1:A:34:HIS:HB3 | 1:A:35:LEU:HA | 10 | 0.18 |
| (1,1007) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 12 | 0.18 |
| (1,1007) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 20 | 0.18 |
| (1,986) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:HA | 13 | 0.17 |
| (1,93) | 1:A:85:LEU:HG | 1:A:86:CYS:H | 12 | 0.17 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 8 | 0.17 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 8 | 0.17 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 8 | 0.17 |
| (1,925) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:55:GLU:HA | 11 | 0.17 |
| (1,925) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:55:GLU:HA | 14 | 0.17 |
| (1,925) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:55:GLU:HA | 16 | 0.17 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 1 | 0.17 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 7 | 0.17 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 8 | 0.17 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 10 | 0.17 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 11 | 0.17 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 12 | 0.17 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 19 | 0.17 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 20 | 0.17 |
| (1,900) | 1:A:87:ASP:HA | 1:A:88:PRO:HB3 | 2 | 0.17 |
| (1,897) | 1:A:27:MET:HB2 | 1:A:28:LYS:HA | 5 | 0.17 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG21 | 4 | 0.17 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG22 | 4 | 0.17 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG23 | 4 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,870) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 10 | 0.17 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:46:GLY:H | 10 | 0.17 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:46:GLY:H | 10 | 0.17 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:46:GLY:H | 10 | 0.17 |
| (1,854) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HB3 | 19 | 0.17 |
| (1,831) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:HA | 9 | 0.17 |
| (1,824) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HB3 | 9 | 0.17 |
| (1,806) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:73:ILE:HG12 | 7 | 0.17 |
| (1,806) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:73:ILE:HG12 | 15 | 0.17 |
| (1,791) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 5 | 0.17 |
| (1,791) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 12 | 0.17 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 4 | 0.17 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 4 | 0.17 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 4 | 0.17 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB1 | 3 | 0.17 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB2 | 3 | 0.17 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB3 | 3 | 0.17 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 2 | 0.17 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 2 | 0.17 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 2 | 0.17 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 13 | 0.17 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 13 | 0.17 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 13 | 0.17 |
| (1,742) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 17 | 0.17 |
| (1,742) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 17 | 0.17 |
| (1,742) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 17 | 0.17 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 13 | 0.17 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 13 | 0.17 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 13 | 0.17 |
| (1,730) | 1:A:85:LEU:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 1 | 0.17 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 5 | 0.17 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 5 | 0.17 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 5 | 0.17 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG21 | 9 | 0.17 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG22 | 9 | 0.17 |
| (1,702) | 1:A:61:PRO:HA | 1:A:62:THR:HG23 | 9 | 0.17 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG21 | 17 | 0.17 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG22 | 17 | 0.17 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG23 | 17 | 0.17 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 16 | 0.17 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 2 | 0.17 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 2 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 2 | 0.17 |
| (1,690) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HA | 10 | 0.17 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD2 | 13 | 0.17 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD2 | 13 | 0.17 |
| (1,689) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD2 | 13 | 0.17 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD11 | 1:A:74:LYS:HE2 | 10 | 0.17 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD12 | 1:A:74:LYS:HE2 | 10 | 0.17 |
| (1,657) | 1:A:73:ILE:HD13 | 1:A:74:LYS:HE2 | 10 | 0.17 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD11 | 2 | 0.17 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD12 | 2 | 0.17 |
| (1,641) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:81:ILE:HD13 | 2 | 0.17 |
| (1,625) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HB3 | 3 | 0.17 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD11 | 3 | 0.17 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD12 | 3 | 0.17 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD13 | 3 | 0.17 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:25:SER:H | 10 | 0.17 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:25:SER:H | 10 | 0.17 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:25:SER:H | 10 | 0.17 |
| (1,565) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:51:ALA:H | 17 | 0.17 |
| (1,554) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:H | 12 | 0.17 |
| (1,545) | 1:A:16:GLU:H | 1:A:18:GLN:H | 17 | 0.17 |
| (1,544) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:16:GLU:H | 15 | 0.17 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:24:ALA:H | 6 | 0.17 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:24:ALA:H | 6 | 0.17 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:24:ALA:H | 6 | 0.17 |
| (1,536) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:60:CYS:H | 8 | 0.17 |
| (1,53) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:22:ILE:HD11 | 20 | 0.17 |
| (1,53) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:22:ILE:HD12 | 20 | 0.17 |
| (1,53) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:22:ILE:HD13 | 20 | 0.17 |
| (1,509) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:56:PHE:H | 2 | 0.17 |
| (1,509) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:56:PHE:H | 14 | 0.17 |
| (1,504) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:12:TRP:HZ2 | 11 | 0.17 |
| (1,504) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:12:TRP:HZ2 | 20 | 0.17 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 13 | 0.17 |
| (1,463) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:79:TYR:H | 15 | 0.17 |
| (1,456) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:54:ASN:HD21 | 7 | 0.17 |
| (1,454) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:H | 4 | 0.17 |
| (1,45) | 1:A:75:ALA:H | 1:A:78:LEU:HG | 5 | 0.17 |
| (1,440) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HA | 4 | 0.17 |
| (1,424) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:13:LYS:HA | 4 | 0.17 |
| (1,424) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:13:LYS:HA | 16 | 0.17 |
| (1,41) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:78:LEU:HG | 6 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,399) | 1:A:26:ARG:HA | 1:A:28:LYS:H | 16 | 0.17 |
| (1,399) | 1:A:26:ARG:HA | 1:A:28:LYS:H | 17 | 0.17 |
| (1,398) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:24:ALA:H | 9 | 0.17 |
| (1,398) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:24:ALA:H | 14 | 0.17 |
| (1,391) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:88:PRO:HD3 | 4 | 0.17 |
| (1,391) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:88:PRO:HD3 | 11 | 0.17 |
| (1,385) | 1:A:87:ASP:H | 1:A:88:PRO:HD3 | 9 | 0.17 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 15 | 0.17 |
| (1,354) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:42:GLN:H | 18 | 0.17 |
| (1,328) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:49:ASN:HB2 | 6 | 0.17 |
| (1,328) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:49:ASN:HB2 | 13 | 0.17 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 12 | 0.17 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 16 | 0.17 |
| (1,319) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:86:CYS:HB2 | 12 | 0.17 |
| (1,310) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:75:ALA:H | 20 | 0.17 |
| (1,307) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:47:CYS:HB2 | 1 | 0.17 |
| (1,307) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:47:CYS:HB2 | 4 | 0.17 |
| (1,300) | 1:A:63:PHE:H | 1:A:63:PHE:HB3 | 6 | 0.17 |
| (1,287) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:H | 10 | 0.17 |
| (1,274) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:56:PHE:H | 7 | 0.17 |
| (1,254) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:57:CYS:HB3 | 3 | 0.17 |
| (1,251) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:60:CYS:H | 4 | 0.17 |
| (1,251) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:60:CYS:H | 7 | 0.17 |
| (1,251) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:60:CYS:H | 14 | 0.17 |
| (1,243) | 1:A:37:GLU:HB2 | 1:A:39:TYR:H | 13 | 0.17 |
| (1,212) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:67:ASP:H | 2 | 0.17 |
| (1,212) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:67:ASP:H | 8 | 0.17 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 6 | 0.17 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 18 | 0.17 |
| (1,200) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:H | 19 | 0.17 |
| (1,189) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:H | 5 | 0.17 |
| (1,1710) | 1:A:87:ASP:H | 1:A:87:ASP:HB2 | 19 | 0.17 |
| (1,1710) | 1:A:87:ASP:H | 1:A:87:ASP:HB3 | 19 | 0.17 |
| (1,1709) | 1:A:86:CYS:HA | 1:A:87:ASP:HB2 | 18 | 0.17 |
| (1,1709) | 1:A:86:CYS:HA | 1:A:87:ASP:HB3 | 18 | 0.17 |
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE2 | 1:A:81:ILE:H | 3 | 0.17 |
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE3 | 1:A:81:ILE:H | 3 | 0.17 |
| (1,168) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 12 | 0.17 |
| (1,168) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 16 | 0.17 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD11 | 1:A:80:LYS:H | 18 | 0.17 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD12 | 1:A:80:LYS:H | 18 | 0.17 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD13 | 1:A:80:LYS:H | 18 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD21 | 1:A:80:LYS:H | 18 | 0.17 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD22 | 1:A:80:LYS:H | 18 | 0.17 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD23 | 1:A:80:LYS:H | 18 | 0.17 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB1 | 9 | 0.17 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB2 | 9 | 0.17 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB3 | 9 | 0.17 |
| (1,1620) | 1:A:59:SER:HB2 | 1:A:60:CYS:H | 7 | 0.17 |
| (1,1620) | 1:A:59:SER:HB3 | 1:A:60:CYS:H | 7 | 0.17 |
| (1,160) | 1:A:79:TYR:H | 1:A:80:LYS:HG3 | 20 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG2 | 2 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG3 | 2 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG2 | 3 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG3 | 3 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG2 | 14 | 0.17 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG3 | 14 | 0.17 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 17 | 0.17 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 17 | 0.17 |
| (1,1521) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:34:HIS:HA | 11 | 0.17 |
| (1,1521) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:34:HIS:HA | 11 | 0.17 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE2 | 3 | 0.17 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE3 | 3 | 0.17 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE2 | 19 | 0.17 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE3 | 19 | 0.17 |
| (1,1483) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HG2 | 1 | 0.17 |
| (1,1483) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HG3 | 1 | 0.17 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD2 | 7 | 0.17 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD3 | 7 | 0.17 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD2 | 7 | 0.17 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD3 | 7 | 0.17 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB1 | 8 | 0.17 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB2 | 8 | 0.17 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB2 | 1:A:24:ALA:HB3 | 8 | 0.17 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB1 | 8 | 0.17 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB2 | 8 | 0.17 |
| (1,1465) | 1:A:21:ASP:HB3 | 1:A:24:ALA:HB3 | 8 | 0.17 |
| (1,1457) | 1:A:20:ASP:HB2 | 1:A:23:GLU:H | 9 | 0.17 |
| (1,1457) | 1:A:20:ASP:HB3 | 1:A:23:GLU:H | 9 | 0.17 |
| (1,1430) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:16:GLU:HG2 | 12 | 0.17 |
| (1,1430) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:16:GLU:HG3 | 12 | 0.17 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB1 | 8 | 0.17 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB2 | 8 | 0.17 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB3 | 8 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1427) | 1:A:16:GLU:H | 1:A:16:GLU:HB2 | 18 | 0.17 |
| (1,1427) | 1:A:16:GLU:H | 1:A:16:GLU:HB3 | 18 | 0.17 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB2 | 1 | 0.17 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB3 | 1 | 0.17 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB2 | 6 | 0.17 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB3 | 6 | 0.17 |
| (1,140) | 1:A:68:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB1 | 5 | 0.17 |
| (1,140) | 1:A:68:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB2 | 5 | 0.17 |
| (1,140) | 1:A:68:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB3 | 5 | 0.17 |
| (1,1394) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:8:HIS:HB2 | 14 | 0.17 |
| (1,1394) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:8:HIS:HB3 | 14 | 0.17 |
| (1,1342) | 1:A:54:ASN:HD22 | 1:A:84:LYS:HG2 | 17 | 0.17 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG21 | 18 | 0.17 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG22 | 18 | 0.17 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG23 | 18 | 0.17 |
| (1,1276) | 1:A:43:LEU:H | 1:A:66:MET:HE1 | 20 | 0.17 |
| (1,1276) | 1:A:43:LEU:H | 1:A:66:MET:HE2 | 20 | 0.17 |
| (1,1276) | 1:A:43:LEU:H | 1:A:66:MET:HE3 | 20 | 0.17 |
| (1,1238) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:57:CYS:H | 9 | 0.17 |
| (1,1227) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:ASN:HA | 19 | 0.17 |
| (1,1220) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:81:ILE:H | 2 | 0.17 |
| (1,1220) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:81:ILE:H | 8 | 0.17 |
| (1,1208) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:H | 7 | 0.17 |
| (1,1208) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:H | 7 | 0.17 |
| (1,1208) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:H | 7 | 0.17 |
| (1,1202) | 1:A:76:LEU:HG | 1:A:77:GLU:H | 15 | 0.17 |
| (1,1186) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HA | 10 | 0.17 |
| (1,1175) | 1:A:72:ALA:HA | 1:A:76:LEU:H | 3 | 0.17 |
| (1,1173) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:40:TYR:HE1 | 5 | 0.17 |
| (1,1122) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:8:HIS:HA | 12 | 0.17 |
| (1,1100) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:58:ALA:HA | 12 | 0.17 |
| (1,1100) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:58:ALA:HA | 15 | 0.17 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 7 | 0.17 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 7 | 0.17 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 7 | 0.17 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 8 | 0.17 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 8 | 0.17 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 8 | 0.17 |
| (1,1088) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG2 | 1 | 0.17 |
| (1,1085) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HA | 10 | 0.17 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 6 | 0.17 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 6 | 0.17 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 6 | 0.17 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 9 | 0.17 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 9 | 0.17 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 9 | 0.17 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 13 | 0.17 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 13 | 0.17 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 13 | 0.17 |
| (1,1055) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:66:MET:HG3 | 19 | 0.17 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:75:ALA:HA | 9 | 0.17 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:75:ALA:HA | 9 | 0.17 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:75:ALA:HA | 9 | 0.17 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:75:ALA:HA | 16 | 0.17 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:75:ALA:HA | 16 | 0.17 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:75:ALA:HA | 16 | 0.17 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:75:ALA:HA | 19 | 0.17 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:75:ALA:HA | 19 | 0.17 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:75:ALA:HA | 19 | 0.17 |
| (1,1017) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:57:CYS:HB2 | 10 | 0.17 |
| (1,1017) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:57:CYS:HB2 | 12 | 0.17 |
| (1,1012) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:79:TYR:HA | 4 | 0.17 |
| (1,1011) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 14 | 0.17 |
| (1,1008) | 1:A:34:HIS:HB3 | 1:A:35:LEU:HA | 1 | 0.17 |
| (1,1008) | 1:A:34:HIS:HB3 | 1:A:35:LEU:HA | 5 | 0.17 |
| (1,1008) | 1:A:34:HIS:HB3 | 1:A:35:LEU:HA | 12 | 0.17 |
| (1,997) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HB3 | 11 | 0.16 |
| (1,997) | 1:A:47:CYS:HB3 | 1:A:86:CYS:HB3 | 14 | 0.16 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG21 | 19 | 0.16 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG22 | 19 | 0.16 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG23 | 19 | 0.16 |
| (1,98) | 1:A:55:GLU:HG3 | 1:A:56:PHE:H | 10 | 0.16 |
| (1,978) | 1:A:86:CYS:HB2 | 1:A:87:ASP:HA | 5 | 0.16 |
| (1,958) | 1:A:69:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 14 | 0.16 |
| (1,93) | 1:A:85:LEU:HG | 1:A:86:CYS:H | 19 | 0.16 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 3 | 0.16 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 9 | 0.16 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 14 | 0.16 |
| (1,913) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HD3 | 4 | 0.16 |
| (1,910) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG3 | 16 | 0.16 |
| (1,900) | 1:A:87:ASP:HA | 1:A:88:PRO:HB3 | 1 | 0.16 |
| (1,900) | 1:A:87:ASP:HA | 1:A:88:PRO:HB3 | 11 | 0.16 |
| (1,900) | 1:A:87:ASP:HA | 1:A:88:PRO:HB3 | 14 | 0.16 |
| (1,900) | 1:A:87:ASP:HA | 1:A:88:PRO:HB3 | 16 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,884) | 1:A:77:GLU:HG2 | 1:A:78:LEU:HA | 7 | 0.16 |
| (1,881) | 1:A:74:LYS:HD2 | 1:A:77:GLU:HG2 | 10 | 0.16 |
| (1,870) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 14 | 0.16 |
| (1,865) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HB2 | 16 | 0.16 |
| (1,854) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HB3 | 10 | 0.16 |
| (1,854) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HB3 | 18 | 0.16 |
| (1,840) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:HA | 17 | 0.16 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 4 | 0.16 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 4 | 0.16 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 4 | 0.16 |
| (1,826) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HA | 5 | 0.16 |
| (1,826) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HA | 18 | 0.16 |
| (1,824) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HB3 | 19 | 0.16 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG21 | 7 | 0.16 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG22 | 7 | 0.16 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG23 | 7 | 0.16 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB1 | 1:A:78:LEU:HB2 | 12 | 0.16 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB2 | 1:A:78:LEU:HB2 | 12 | 0.16 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB3 | 1:A:78:LEU:HB2 | 12 | 0.16 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB1 | 1:A:78:LEU:HB2 | 19 | 0.16 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB2 | 1:A:78:LEU:HB2 | 19 | 0.16 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB3 | 1:A:78:LEU:HB2 | 19 | 0.16 |
| (1,791) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 7 | 0.16 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB1 | 6 | 0.16 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB3 | 6 | 0.16 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB1 | 19 | 0.16 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB2 | 19 | 0.16 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB3 | 19 | 0.16 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 8 | 0.16 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 8 | 0.16 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 8 | 0.16 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB1 | 2 | 0.16 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB2 | 2 | 0.16 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB3 | 2 | 0.16 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HA | 4 | 0.16 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HA | 4 | 0.16 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HA | 4 | 0.16 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 17 | 0.16 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB1 | 8 | 0.16 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB2 | 8 | 0.16 |
| (1,692) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HB3 | 8 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,690) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HA | 2 | 0.16 |
| (1,690) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HA | 13 | 0.16 |
| (1,680) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HG21 | 7 | 0.16 |
| (1,680) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HG22 | 7 | 0.16 |
| (1,680) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HG23 | 7 | 0.16 |
| (1,656) | 1:A:43:LEU:HD11 | 1:A:78:LEU:HG | 17 | 0.16 |
| (1,656) | 1:A:43:LEU:HD12 | 1:A:78:LEU:HG | 17 | 0.16 |
| (1,656) | 1:A:43:LEU:HD13 | 1:A:78:LEU:HG | 17 | 0.16 |
| (1,640) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:83:ALA:HA | 6 | 0.16 |
| (1,640) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:83:ALA:HA | 6 | 0.16 |
| (1,640) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:83:ALA:HA | 6 | 0.16 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 7 | 0.16 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 7 | 0.16 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 7 | 0.16 |
| (1,625) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HB3 | 6 | 0.16 |
| (1,625) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HB3 | 12 | 0.16 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD11 | 1 | 0.16 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD12 | 1 | 0.16 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD13 | 1 | 0.16 |
| (1,554) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:70:ALA:H | 15 | 0.16 |
| (1,53) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:22:ILE:HD11 | 16 | 0.16 |
| (1,53) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:22:ILE:HD12 | 16 | 0.16 |
| (1,53) | 1:A:21:ASP:H | 1:A:22:ILE:HD13 | 16 | 0.16 |
| (1,509) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:56:PHE:H | 5 | 0.16 |
| (1,509) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:56:PHE:H | 11 | 0.16 |
| (1,509) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:56:PHE:H | 19 | 0.16 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 3 | 0.16 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 6 | 0.16 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 9 | 0.16 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 12 | 0.16 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 19 | 0.16 |
| (1,470) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 6 | 0.16 |
| (1,462) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:82:ASN:H | 11 | 0.16 |
| (1,454) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:H | 9 | 0.16 |
| (1,454) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:H | 20 | 0.16 |
| (1,440) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HA | 13 | 0.16 |
| (1,405) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:65:ARG:HA | 20 | 0.16 |
| (1,398) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:24:ALA:H | 5 | 0.16 |
| (1,398) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:24:ALA:H | 6 | 0.16 |
| (1,389) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:H | 12 | 0.16 |
| (1,367) | 1:A:41:HIS:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 14 | 0.16 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:83:ALA:H | 13 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:83:ALA:H | 13 | 0.16 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:83:ALA:H | 13 | 0.16 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 18 | 0.16 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 20 | 0.16 |
| (1,349) | 1:A:79:TYR:HB3 | 1:A:82:ASN:H | 7 | 0.16 |
| (1,339) | 1:A:62:THR:H | 1:A:63:PHE:HB2 | 5 | 0.16 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 11 | 0.16 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 15 | 0.16 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 1 | 0.16 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 7 | 0.16 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 8 | 0.16 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 15 | 0.16 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 20 | 0.16 |
| (1,324) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:H | 5 | 0.16 |
| (1,324) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:H | 8 | 0.16 |
| (1,324) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:H | 9 | 0.16 |
| (1,324) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:H | 19 | 0.16 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 5 | 0.16 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:H | 9 | 0.16 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:H | 9 | 0.16 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:H | 9 | 0.16 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:H | 16 | 0.16 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:H | 16 | 0.16 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:H | 16 | 0.16 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:H | 20 | 0.16 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:H | 20 | 0.16 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:H | 20 | 0.16 |
| (1,288) | 1:A:25:SER:H | 1:A:27:MET:HG2 | 5 | 0.16 |
| (1,287) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:H | 3 | 0.16 |
| (1,287) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:H | 15 | 0.16 |
| (1,260) | 1:A:61:PRO:HB2 | 1:A:63:PHE:H | 6 | 0.16 |
| (1,243) | 1:A:37:GLU:HB2 | 1:A:39:TYR:H | 4 | 0.16 |
| (1,239) | 1:A:61:PRO:HG2 | 1:A:63:PHE:H | 7 | 0.16 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:72:ALA:H | 13 | 0.16 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:72:ALA:H | 13 | 0.16 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:72:ALA:H | 13 | 0.16 |
| (1,226) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:77:GLU:HB3 | 2 | 0.16 |
| (1,226) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:77:GLU:HB3 | 14 | 0.16 |
| (1,212) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:67:ASP:H | 3 | 0.16 |
| (1,212) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:67:ASP:H | 15 | 0.16 |
| (1,203) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:H | 15 | 0.16 |
| (1,189) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:H | 12 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,189) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:H | 18 | 0.16 |
| (1,181) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:65:ARG:HB3 | 13 | 0.16 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG2 | 7 | 0.16 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG3 | 7 | 0.16 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG2 | 7 | 0.16 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG3 | 7 | 0.16 |
| (1,1710) | 1:A:87:ASP:H | 1:A:87:ASP:HB2 | 6 | 0.16 |
| (1,1710) | 1:A:87:ASP:H | 1:A:87:ASP:HB3 | 6 | 0.16 |
| (1,1682) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 20 | 0.16 |
| (1,1682) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 20 | 0.16 |
| (1,168) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 20 | 0.16 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB1 | 2 | 0.16 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB2 | 2 | 0.16 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB3 | 2 | 0.16 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB1 | 5 | 0.16 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB2 | 5 | 0.16 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB3 | 5 | 0.16 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 11 | 0.16 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 11 | 0.16 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 11 | 0.16 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 11 | 0.16 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 11 | 0.16 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 11 | 0.16 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB2 | 9 | 0.16 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB3 | 9 | 0.16 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG2 | 6 | 0.16 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG3 | 6 | 0.16 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 5 | 0.16 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 5 | 0.16 |
| (1,1580) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:87:ASP:HB2 | 19 | 0.16 |
| (1,1580) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:87:ASP:HB3 | 19 | 0.16 |
| (1,1540) | 1:A:35:LEU:HD11 | 1:A:82:ASN:HA | 4 | 0.16 |
| (1,1540) | 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:82:ASN:HA | 4 | 0.16 |
| (1,1540) | 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:82:ASN:HA | 4 | 0.16 |
| (1,1540) | 1:A:35:LEU:HD21 | 1:A:82:ASN:HA | 4 | 0.16 |
| (1,1540) | 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:82:ASN:HA | 4 | 0.16 |
| (1,1540) | 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:82:ASN:HA | 4 | 0.16 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE2 | 13 | 0.16 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE3 | 13 | 0.16 |
| (1,1491) | 1:A:26:ARG:HD2 | 1:A:27:MET:H | 11 | 0.16 |
| (1,1491) | 1:A:26:ARG:HD3 | 1:A:27:MET:H | 11 | 0.16 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD2 | 20 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD3 | 20 | 0.16 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD2 | 20 | 0.16 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD3 | 20 | 0.16 |
| (1,1439) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:H | 8 | 0.16 |
| (1,1439) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:H | 8 | 0.16 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB1 | 18 | 0.16 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB2 | 18 | 0.16 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB3 | 18 | 0.16 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB2 | 5 | 0.16 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB3 | 5 | 0.16 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB2 | 13 | 0.16 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB3 | 13 | 0.16 |
| (1,1378) | 1:A:4:MET:HB2 | 1:A:6:LYS:H | 1 | 0.16 |
| (1,1378) | 1:A:4:MET:HB3 | 1:A:6:LYS:H | 1 | 0.16 |
| (1,1262) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HA | 8 | 0.16 |
| (1,1262) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HA | 13 | 0.16 |
| (1,1262) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HA | 19 | 0.16 |
| (1,1236) | 1:A:50:GLU:HA | 1:A:52:CYS:H | 17 | 0.16 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 2 | 0.16 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 8 | 0.16 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 20 | 0.16 |
| (1,1202) | 1:A:76:LEU:HG | 1:A:77:GLU:H | 5 | 0.16 |
| (1,1202) | 1:A:76:LEU:HG | 1:A:77:GLU:H | 14 | 0.16 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HD1 | 8 | 0.16 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HD1 | 8 | 0.16 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HD1 | 8 | 0.16 |
| (1,1186) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HA | 11 | 0.16 |
| (1,1138) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:39:TYR:HE2 | 14 | 0.16 |
| (1,1124) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:22:ILE:HB | 4 | 0.16 |
| (1,1124) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:22:ILE:HB | 6 | 0.16 |
| (1,1100) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:58:ALA:HA | 3 | 0.16 |
| (1,1100) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:58:ALA:HA | 10 | 0.16 |
| (1,1100) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:58:ALA:HA | 13 | 0.16 |
| (1,1100) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:58:ALA:HA | 14 | 0.16 |
| (1,1100) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:58:ALA:HA | 20 | 0.16 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 9 | 0.16 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 9 | 0.16 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 9 | 0.16 |
| (1,1093) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD21 | 4 | 0.16 |
| (1,1093) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD22 | 4 | 0.16 |
| (1,1093) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD23 | 4 | 0.16 |
| (1,1093) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD21 | 18 | 0.16 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1093) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD22 | 18 | 0.16 |
| (1,1093) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD23 | 18 | 0.16 |
| (1,1088) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG2 | 12 | 0.16 |
| (1,1088) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HG2 | 18 | 0.16 |
| (1,1080) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:74:LYS:HE3 | 16 | 0.16 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:75:ALA:HA | 11 | 0.16 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:75:ALA:HA | 11 | 0.16 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:75:ALA:HA | 11 | 0.16 |
| (1,1021) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HB | 11 | 0.16 |
| (1,1017) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:57:CYS:HB2 | 5 | 0.16 |
| (1,1012) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:79:TYR:HA | 3 | 0.16 |
| (1,1011) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 12 | 0.16 |
| (1,1007) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 11 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:82:ASN:H | 9 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:82:ASN:H | 9 | 0.16 |
| (1,1) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:82:ASN:H | 9 | 0.16 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB1 | 12 | 0.15 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,989) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,986) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:HA | 1 | 0.15 |
| (1,986) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:HA | 6 | 0.15 |
| (1,986) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:HA | 8 | 0.15 |
| (1,974) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 5 | 0.15 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 4 | 0.15 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 4 | 0.15 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 4 | 0.15 |
| (1,925) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:55:GLU:HA | 10 | 0.15 |
| (1,925) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:55:GLU:HA | 13 | 0.15 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 4 | 0.15 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 4 | 0.15 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 13 | 0.15 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 15 | 0.15 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 16 | 0.15 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 18 | 0.15 |
| (1,900) | 1:A:87:ASP:HA | 1:A:88:PRO:HB3 | 15 | 0.15 |
| (1,897) | 1:A:27:MET:HB2 | 1:A:28:LYS:HA | 7 | 0.15 |
| (1,885) | 1:A:58:ALA:HB1 | 1:A:66:MET:HE1 | 20 | 0.15 |
| (1,885) | 1:A:58:ALA:HB1 | 1:A:66:MET:HE2 | 20 | 0.15 |
| (1,885) | 1:A:58:ALA:HB1 | 1:A:66:MET:HE3 | 20 | 0.15 |
| (1,885) | 1:A:58:ALA:HB2 | 1:A:66:MET:HE1 | 20 | 0.15 |
| (1,885) | 1:A:58:ALA:HB2 | 1:A:66:MET:HE2 | 20 | 0.15 |
| (1,885) | 1:A:58:ALA:HB2 | 1:A:66:MET:HE3 | 20 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,885) | 1:A:58:ALA:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 20 | 0.15 |
| (1,885) | 1:A:58:ALA:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 20 | 0.15 |
| (1,885) | 1:A:58:ALA:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 20 | 0.15 |
| (1,884) | 1:A:77:GLU:HG2 | 1:A:78:LEU:HA | 6 | 0.15 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB1 | 10 | 0.15 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB2 | 10 | 0.15 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB1 | 18 | 0.15 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB2 | 18 | 0.15 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB3 | 18 | 0.15 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG21 | 6 | 0.15 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG22 | 6 | 0.15 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG23 | 6 | 0.15 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG21 | 10 | 0.15 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG22 | 10 | 0.15 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG23 | 10 | 0.15 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG21 | 17 | 0.15 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG22 | 17 | 0.15 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG23 | 17 | 0.15 |
| (1,857) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:23:GLU:HB3 | 17 | 0.15 |
| (1,824) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HB3 | 18 | 0.15 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG21 | 1 | 0.15 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG22 | 1 | 0.15 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG23 | 1 | 0.15 |
| (1,798) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HA | 7 | 0.15 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB1 | 1:A:78:LEU:HB2 | 8 | 0.15 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB2 | 1:A:78:LEU:HB2 | 8 | 0.15 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB3 | 1:A:78:LEU:HB2 | 8 | 0.15 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB1 | 1:A:78:LEU:HB2 | 11 | 0.15 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB2 | 1:A:78:LEU:HB2 | 11 | 0.15 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB3 | 1:A:78:LEU:HB2 | 11 | 0.15 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:71:ALA:HA | 1 | 0.15 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 1 | 0.15 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:71:ALA:HA | 1 | 0.15 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:71:ALA:HA | 11 | 0.15 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 11 | 0.15 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:71:ALA:HA | 11 | 0.15 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:71:ALA:HA | 15 | 0.15 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 15 | 0.15 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:71:ALA:HA | 15 | 0.15 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:71:ALA:HA | 18 | 0.15 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 18 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:71:ALA:HA | 18 | 0.15 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB1 | 15 | 0.15 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB2 | 15 | 0.15 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB3 | 15 | 0.15 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 19 | 0.15 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 19 | 0.15 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 19 | 0.15 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 10 | 0.15 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 10 | 0.15 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,724) | 1:A:85:LEU:HG | 1:A:86:CYS:HA | 16 | 0.15 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG21 | 6 | 0.15 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG22 | 6 | 0.15 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG23 | 6 | 0.15 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG21 | 7 | 0.15 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG22 | 7 | 0.15 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG23 | 7 | 0.15 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG21 | 19 | 0.15 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG22 | 19 | 0.15 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG23 | 19 | 0.15 |
| (1,717) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HG13 | 1 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG21 | 7 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG22 | 7 | 0.15 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG23 | 7 | 0.15 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG21 | 1:A:63:PHE:H | 14 | 0.15 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG22 | 1:A:63:PHE:H | 14 | 0.15 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG23 | 1:A:63:PHE:H | 14 | 0.15 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG21 | 1:A:63:PHE:H | 17 | 0.15 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG22 | 1:A:63:PHE:H | 17 | 0.15 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG23 | 1:A:63:PHE:H | 17 | 0.15 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD3 | 11 | 0.15 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD3 | 11 | 0.15 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD3 | 11 | 0.15 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG21 | 2 | 0.15 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG22 | 2 | 0.15 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG23 | 2 | 0.15 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG21 | 19 | 0.15 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG22 | 19 | 0.15 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG23 | 19 | 0.15 |
| (1,655) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 14 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,655) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 16 | 0.15 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB1 | 1:A:59:SER:HA | 12 | 0.15 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB2 | 1:A:59:SER:HA | 12 | 0.15 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB3 | 1:A:59:SER:HA | 12 | 0.15 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB1 | 9 | 0.15 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB2 | 9 | 0.15 |
| (1,636) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:HA | 13 | 0.15 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:HA | 13 | 0.15 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:HA | 13 | 0.15 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:HA | 16 | 0.15 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:HA | 16 | 0.15 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:HA | 16 | 0.15 |
| (1,625) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HB3 | 11 | 0.15 |
| (1,625) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HB3 | 19 | 0.15 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD11 | 2 | 0.15 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD12 | 2 | 0.15 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD13 | 2 | 0.15 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:25:SER:H | 5 | 0.15 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:25:SER:H | 5 | 0.15 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:25:SER:H | 5 | 0.15 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:25:SER:H | 19 | 0.15 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:25:SER:H | 19 | 0.15 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:25:SER:H | 19 | 0.15 |
| (1,56) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:23:GLU:H | 14 | 0.15 |
| (1,56) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:23:GLU:H | 14 | 0.15 |
| (1,56) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:23:GLU:H | 14 | 0.15 |
| (1,528) | 1:A:53:THR:H | 1:A:63:PHE:H | 10 | 0.15 |
| (1,509) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:56:PHE:H | 10 | 0.15 |
| (1,509) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:56:PHE:H | 16 | 0.15 |
| (1,506) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:CYS:H | 4 | 0.15 |
| (1,504) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:12:TRP:HZ2 | 12 | 0.15 |
| (1,504) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:12:TRP:HZ2 | 13 | 0.15 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 11 | 0.15 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 20 | 0.15 |
| (1,462) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:82:ASN:H | 6 | 0.15 |
| (1,462) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:82:ASN:H | 15 | 0.15 |
| (1,454) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:H | 17 | 0.15 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 15 | 0.15 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 15 | 0.15 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 15 | 0.15 |
| (1,426) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:60:CYS:H | 15 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,426) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:60:CYS:H | 16 | 0.15 |
| (1,405) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:65:ARG:HA | 3 | 0.15 |
| (1,405) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:65:ARG:HA | 17 | 0.15 |
| (1,400) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:75:ALA:H | 2 | 0.15 |
| (1,400) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:75:ALA:H | 16 | 0.15 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 9 | 0.15 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 9 | 0.15 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 9 | 0.15 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD11 | 11 | 0.15 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD12 | 11 | 0.15 |
| (1,37) | 1:A:80:LYS:H | 1:A:81:ILE:HD13 | 11 | 0.15 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:83:ALA:H | 20 | 0.15 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:83:ALA:H | 20 | 0.15 |
| (1,36) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:83:ALA:H | 20 | 0.15 |
| (1,353) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:34:HIS:HB2 | 11 | 0.15 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 2 | 0.15 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 10 | 0.15 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 14 | 0.15 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 18 | 0.15 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 19 | 0.15 |
| (1,325) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:H | 19 | 0.15 |
| (1,324) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:H | 10 | 0.15 |
| (1,319) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:86:CYS:HB2 | 4 | 0.15 |
| (1,319) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:86:CYS:HB2 | 5 | 0.15 |
| (1,310) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:75:ALA:H | 17 | 0.15 |
| (1,300) | 1:A:63:PHE:H | 1:A:63:PHE:HB3 | 4 | 0.15 |
| (1,300) | 1:A:63:PHE:H | 1:A:63:PHE:HB3 | 18 | 0.15 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:H | 19 | 0.15 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:H | 19 | 0.15 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:H | 19 | 0.15 |
| (1,287) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:H | 5 | 0.15 |
| (1,276) | 1:A:66:MET:HG3 | 1:A:71:ALA:H | 6 | 0.15 |
| (1,276) | 1:A:66:MET:HG3 | 1:A:71:ALA:H | 19 | 0.15 |
| (1,275) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:57:CYS:H | 3 | 0.15 |
| (1,251) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:60:CYS:H | 19 | 0.15 |
| (1,212) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:67:ASP:H | 12 | 0.15 |
| (1,212) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:67:ASP:H | 19 | 0.15 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 20 | 0.15 |
| (1,208) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:43:LEU:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,183) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HB2 | 4 | 0.15 |
| (1,183) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HB2 | 19 | 0.15 |
| (1,180) | 1:A:88:PRO:HB2 | 1:A:89:HIS:H | 11 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG2 | 16 | 0.15 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HG3 | 16 | 0.15 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG2 | 16 | 0.15 |
| (1,1719) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HG3 | 16 | 0.15 |
| (1,1714) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:HB2 | 9 | 0.15 |
| (1,1714) | 1:A:88:PRO:HA | 1:A:89:HIS:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG2 | 11 | 0.15 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG3 | 11 | 0.15 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG2 | 11 | 0.15 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG3 | 11 | 0.15 |
| (1,1709) | 1:A:86:CYS:HA | 1:A:87:ASP:HB2 | 13 | 0.15 |
| (1,1709) | 1:A:86:CYS:HA | 1:A:87:ASP:HB3 | 13 | 0.15 |
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE2 | 1:A:81:ILE:H | 7 | 0.15 |
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE3 | 1:A:81:ILE:H | 7 | 0.15 |
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE2 | 1:A:81:ILE:H | 19 | 0.15 |
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE3 | 1:A:81:ILE:H | 19 | 0.15 |
| (1,168) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 15 | 0.15 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD11 | 1:A:80:LYS:H | 20 | 0.15 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD12 | 1:A:80:LYS:H | 20 | 0.15 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD13 | 1:A:80:LYS:H | 20 | 0.15 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD21 | 1:A:80:LYS:H | 20 | 0.15 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD22 | 1:A:80:LYS:H | 20 | 0.15 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD23 | 1:A:80:LYS:H | 20 | 0.15 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 4 | 0.15 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 4 | 0.15 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 4 | 0.15 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 4 | 0.15 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 4 | 0.15 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 4 | 0.15 |
| (1,160) | 1:A:79:TYR:H | 1:A:80:LYS:HG3 | 3 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG2 | 5 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG3 | 5 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG2 | 17 | 0.15 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG3 | 17 | 0.15 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 2 | 0.15 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 2 | 0.15 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 19 | 0.15 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 19 | 0.15 |
| (1,1540) | 1:A:35:LEU:HD11 | 1:A:82:ASN:HA | 5 | 0.15 |
| (1,1540) | 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:82:ASN:HA | 5 | 0.15 |
| (1,1540) | 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:82:ASN:HA | 5 | 0.15 |
| (1,1540) | 1:A:35:LEU:HD21 | 1:A:82:ASN:HA | 5 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1540) | 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:82:ASN:HA | 5 | 0.15 |
| (1,1540) | 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:82:ASN:HA | 5 | 0.15 |
| (1,1521) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:34:HIS:HA | 18 | 0.15 |
| (1,1521) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:34:HIS:HA | 18 | 0.15 |
| (1,1521) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:34:HIS:HA | 19 | 0.15 |
| (1,1521) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:34:HIS:HA | 19 | 0.15 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 13 | 0.15 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 13 | 0.15 |
| (1,1510) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD11 | 13 | 0.15 |
| (1,1510) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 13 | 0.15 |
| (1,1510) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD13 | 13 | 0.15 |
| (1,1510) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD21 | 13 | 0.15 |
| (1,1510) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD22 | 13 | 0.15 |
| (1,1510) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD23 | 13 | 0.15 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE2 | 11 | 0.15 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE3 | 11 | 0.15 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE2 | 14 | 0.15 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE3 | 14 | 0.15 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE2 | 17 | 0.15 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE3 | 17 | 0.15 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE2 | 16 | 0.15 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE3 | 16 | 0.15 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE2 | 19 | 0.15 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE3 | 19 | 0.15 |
| (1,1443) | 1:A:18:GLN:HG2 | 1:A:19:SER:H | 10 | 0.15 |
| (1,1443) | 1:A:18:GLN:HG3 | 1:A:19:SER:H | 10 | 0.15 |
| (1,1443) | 1:A:18:GLN:HG2 | 1:A:19:SER:H | 19 | 0.15 |
| (1,1443) | 1:A:18:GLN:HG3 | 1:A:19:SER:H | 19 | 0.15 |
| (1,1441) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:HB2 | 5 | 0.15 |
| (1,1441) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:HB3 | 5 | 0.15 |
| (1,1441) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:HB2 | 5 | 0.15 |
| (1,1441) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:HB3 | 5 | 0.15 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB1 | 9 | 0.15 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB2 | 9 | 0.15 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB3 | 9 | 0.15 |
| (1,1422) | 1:A:14:SER:HB2 | 1:A:16:GLU:H | 17 | 0.15 |
| (1,1422) | 1:A:14:SER:HB3 | 1:A:16:GLU:H | 17 | 0.15 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB2 | 10 | 0.15 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB3 | 10 | 0.15 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB2 | 14 | 0.15 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB3 | 14 | 0.15 |
| (1,1401) | 1:A:10:CYS:HB2 | 1:A:11:TYR:H | 2 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1401) | 1:A:10:CYS:HB3 | 1:A:11:TYR:H | 2 | 0.15 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG21 | 4 | 0.15 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG22 | 4 | 0.15 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG23 | 4 | 0.15 |
| (1,1281) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:43:LEU:H | 11 | 0.15 |
| (1,1281) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:43:LEU:H | 13 | 0.15 |
| (1,1262) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HA | 1 | 0.15 |
| (1,1262) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HA | 11 | 0.15 |
| (1,1208) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:H | 1 | 0.15 |
| (1,1208) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:H | 1 | 0.15 |
| (1,1208) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:H | 1 | 0.15 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 4 | 0.15 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 6 | 0.15 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 9 | 0.15 |
| (1,1173) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:40:TYR:HE1 | 19 | 0.15 |
| (1,1151) | 1:A:11:TYR:HA | 1:A:11:TYR:HE1 | 10 | 0.15 |
| (1,1142) | 1:A:36:ILE:HA | 1:A:39:TYR:HE2 | 5 | 0.15 |
| (1,1111) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HA | 2 | 0.15 |
| (1,1111) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HA | 10 | 0.15 |
| (1,1111) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HA | 16 | 0.15 |
| (1,1111) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HA | 19 | 0.15 |
| (1,1100) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:58:ALA:HA | 5 | 0.15 |
| (1,1100) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:58:ALA:HA | 16 | 0.15 |
| (1,1100) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:58:ALA:HA | 17 | 0.15 |
| (1,1100) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:58:ALA:HA | 19 | 0.15 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 11 | 0.15 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 11 | 0.15 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 11 | 0.15 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 12 | 0.15 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 12 | 0.15 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 12 | 0.15 |
| (1,1097) | 1:A:6:LYS:HA | 1:A:6:LYS:HG3 | 10 | 0.15 |
| (1,1093) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD21 | 6 | 0.15 |
| (1,1093) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD22 | 6 | 0.15 |
| (1,1093) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:7:LEU:HD23 | 6 | 0.15 |
| (1,1085) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HA | 2 | 0.15 |
| (1,1085) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HA | 3 | 0.15 |
| (1,1085) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HA | 14 | 0.15 |
| (1,1085) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HA | 16 | 0.15 |
| (1,1080) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:74:LYS:HE3 | 3 | 0.15 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 8 | 0.15 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 8 | 0.15 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 8 | 0.15 |
| (1,1055) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:66:MET:HG3 | 16 | 0.15 |
| (1,1047) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HA | 8 | 0.15 |
| (1,1040) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HD3 | 4 | 0.15 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:75:ALA:HA | 13 | 0.15 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:75:ALA:HA | 13 | 0.15 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:75:ALA:HA | 13 | 0.15 |
| (1,1017) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:57:CYS:HB2 | 6 | 0.15 |
| (1,1011) | 1:A:31:ALA:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 19 | 0.15 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG21 | 8 | 0.14 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG22 | 8 | 0.14 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG23 | 8 | 0.14 |
| (1,986) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:HA | 4 | 0.14 |
| (1,985) | 1:A:79:TYR:HB2 | 1:A:80:LYS:HA | 5 | 0.14 |
| (1,958) | 1:A:69:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 11 | 0.14 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HG2 | 11 | 0.14 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 11 | 0.14 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HG2 | 11 | 0.14 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HG2 | 18 | 0.14 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 18 | 0.14 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HG2 | 18 | 0.14 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 1 | 0.14 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 1 | 0.14 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 1 | 0.14 |
| (1,925) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:55:GLU:HA | 18 | 0.14 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 2 | 0.14 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 5 | 0.14 |
| (1,920) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 6 | 0.14 |
| (1,900) | 1:A:87:ASP:HA | 1:A:88:PRO:HB3 | 5 | 0.14 |
| (1,900) | 1:A:87:ASP:HA | 1:A:88:PRO:HB3 | 12 | 0.14 |
| (1,897) | 1:A:27:MET:HB2 | 1:A:28:LYS:HA | 4 | 0.14 |
| (1,897) | 1:A:27:MET:HB2 | 1:A:28:LYS:HA | 16 | 0.14 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG21 | 1 | 0.14 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG22 | 1 | 0.14 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG23 | 1 | 0.14 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG21 | 5 | 0.14 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG22 | 5 | 0.14 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG23 | 5 | 0.14 |
| (1,865) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HB2 | 1 | 0.14 |
| (1,865) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HB2 | 9 | 0.14 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:46:GLY:H | 18 | 0.14 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:46:GLY:H | 18 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:46:GLY:H | 18 | 0.14 |
| (1,854) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HB3 | 6 | 0.14 |
| (1,833) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HB | 15 | 0.14 |
| (1,833) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HB | 15 | 0.14 |
| (1,833) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HB | 15 | 0.14 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD11 | 16 | 0.14 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD12 | 16 | 0.14 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD13 | 16 | 0.14 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB1 | 1:A:78:LEU:HB2 | 4 | 0.14 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB2 | 1:A:78:LEU:HB2 | 4 | 0.14 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB3 | 1:A:78:LEU:HB2 | 4 | 0.14 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB1 | 1:A:78:LEU:HB2 | 6 | 0.14 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB2 | 1:A:78:LEU:HB2 | 6 | 0.14 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB3 | 1:A:78:LEU:HB2 | 6 | 0.14 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB1 | 1:A:78:LEU:HB2 | 13 | 0.14 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB2 | 1:A:78:LEU:HB2 | 13 | 0.14 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB3 | 1:A:78:LEU:HB2 | 13 | 0.14 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB1 | 1:A:78:LEU:HB2 | 14 | 0.14 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB2 | 1:A:78:LEU:HB2 | 14 | 0.14 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB3 | 1:A:78:LEU:HB2 | 14 | 0.14 |
| (1,791) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 10 | 0.14 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 1 | 0.14 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 1 | 0.14 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 1 | 0.14 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 1 | 0.14 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 1 | 0.14 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 1 | 0.14 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 1 | 0.14 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 1 | 0.14 |
| (1,781) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 1 | 0.14 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 1 | 0.14 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 1 | 0.14 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 1 | 0.14 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 14 | 0.14 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 14 | 0.14 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 14 | 0.14 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 16 | 0.14 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 16 | 0.14 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 16 | 0.14 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB1 | 6 | 0.14 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB2 | 6 | 0.14 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB3 | 6 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB1 | 8 | 0.14 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB2 | 8 | 0.14 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB3 | 8 | 0.14 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG21 | 4 | 0.14 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG22 | 4 | 0.14 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG23 | 4 | 0.14 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB1 | 2 | 0.14 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB2 | 2 | 0.14 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HB3 | 2 | 0.14 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB1 | 2 | 0.14 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB2 | 2 | 0.14 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HB3 | 2 | 0.14 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB1 | 2 | 0.14 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB2 | 2 | 0.14 |
| (1,715) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HB3 | 2 | 0.14 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HA | 2 | 0.14 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HA | 2 | 0.14 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HA | 2 | 0.14 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 13 | 0.14 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 19 | 0.14 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG21 | 1:A:63:PHE:H | 8 | 0.14 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG22 | 1:A:63:PHE:H | 8 | 0.14 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG23 | 1:A:63:PHE:H | 8 | 0.14 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG21 | 1:A:63:PHE:H | 10 | 0.14 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG22 | 1:A:63:PHE:H | 10 | 0.14 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG23 | 1:A:63:PHE:H | 10 | 0.14 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG21 | 12 | 0.14 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG22 | 12 | 0.14 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG23 | 12 | 0.14 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG21 | 15 | 0.14 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG22 | 15 | 0.14 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG23 | 15 | 0.14 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG21 | 17 | 0.14 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG22 | 17 | 0.14 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG23 | 17 | 0.14 |
| (1,655) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 8 | 0.14 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD11 | 6 | 0.14 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD12 | 6 | 0.14 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:36:ILE:HD13 | 6 | 0.14 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD11 | 6 | 0.14 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD12 | 6 | 0.14 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:36:ILE:HD13 | 6 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD11 | 6 | 0.14 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD12 | 6 | 0.14 |
| (1,616) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:36:ILE:HD13 | 6 | 0.14 |
| (1,546) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:72:ALA:H | 4 | 0.14 |
| (1,506) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:CYS:H | 3 | 0.14 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 10 | 0.14 |
| (1,479) | 1:A:11:TYR:HD1 | 1:A:12:TRP:H | 11 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:82:ASN:HD21 | 3 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:82:ASN:HD21 | 3 | 0.14 |
| (1,47) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:82:ASN:HD21 | 3 | 0.14 |
| (1,461) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:83:ALA:H | 11 | 0.14 |
| (1,461) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:83:ALA:H | 12 | 0.14 |
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 12 | 0.14 |
| (1,451) | 1:A:8:HIS:HA | 1:A:9:GLN:H | 3 | 0.14 |
| (1,450) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:23:GLU:H | 4 | 0.14 |
| (1,450) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:23:GLU:H | 11 | 0.14 |
| (1,450) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:23:GLU:H | 18 | 0.14 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 5 | 0.14 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 5 | 0.14 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 5 | 0.14 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:H | 10 | 0.14 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:H | 10 | 0.14 |
| (1,44) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:H | 10 | 0.14 |
| (1,435) | 1:A:18:GLN:HA | 1:A:19:SER:H | 13 | 0.14 |
| (1,424) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:13:LYS:HA | 7 | 0.14 |
| (1,424) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:13:LYS:HA | 19 | 0.14 |
| (1,41) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:78:LEU:HG | 8 | 0.14 |
| (1,400) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:75:ALA:H | 7 | 0.14 |
| (1,399) | 1:A:26:ARG:HA | 1:A:28:LYS:H | 2 | 0.14 |
| (1,399) | 1:A:26:ARG:HA | 1:A:28:LYS:H | 3 | 0.14 |
| (1,398) | 1:A:22:ILE:HA | 1:A:24:ALA:H | 12 | 0.14 |
| (1,396) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:45:GLU:H | 6 | 0.14 |
| (1,396) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:45:GLU:H | 7 | 0.14 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 3 | 0.14 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 6 | 0.14 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 9 | 0.14 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 11 | 0.14 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 12 | 0.14 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 13 | 0.14 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 17 | 0.14 |
| (1,324) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:H | 12 | 0.14 |
| (1,304) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:46:GLY:H | 19 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,300) | 1:A:63:PHE:H | 1:A:63:PHE:HB3 | 13 | 0.14 |
| (1,291) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:47:CYS:H | 2 | 0.14 |
| (1,276) | 1:A:66:MET:HG3 | 1:A:71:ALA:H | 8 | 0.14 |
| (1,276) | 1:A:66:MET:HG3 | 1:A:71:ALA:H | 16 | 0.14 |
| (1,271) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:55:GLU:H | 18 | 0.14 |
| (1,265) | 1:A:66:MET:HG2 | 1:A:67:ASP:H | 2 | 0.14 |
| (1,240) | 1:A:88:PRO:HB3 | 1:A:89:HIS:H | 2 | 0.14 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:H | 16 | 0.14 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:H | 16 | 0.14 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:H | 16 | 0.14 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:H | 19 | 0.14 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:H | 19 | 0.14 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:H | 19 | 0.14 |
| (1,226) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:77:GLU:HB3 | 4 | 0.14 |
| (1,226) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:77:GLU:HB3 | 11 | 0.14 |
| (1,212) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:67:ASP:H | 7 | 0.14 |
| (1,189) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:H | 11 | 0.14 |
| (1,189) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:H | 16 | 0.14 |
| (1,178) | 1:A:23:GLU:H | 1:A:26:ARG:HG3 | 11 | 0.14 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG2 | 1:A:89:HIS:H | 8 | 0.14 |
| (1,1715) | 1:A:88:PRO:HG3 | 1:A:89:HIS:H | 8 | 0.14 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE2 | 1:A:85:LEU:H | 3 | 0.14 |
| (1,1701) | 1:A:84:LYS:HE3 | 1:A:85:LEU:H | 3 | 0.14 |
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE2 | 1:A:81:ILE:H | 4 | 0.14 |
| (1,1690) | 1:A:80:LYS:HE3 | 1:A:81:ILE:H | 4 | 0.14 |
| (1,168) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 3 | 0.14 |
| (1,168) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 4 | 0.14 |
| (1,168) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 6 | 0.14 |
| (1,168) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 8 | 0.14 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD11 | 1:A:80:LYS:H | 12 | 0.14 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD12 | 1:A:80:LYS:H | 12 | 0.14 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD13 | 1:A:80:LYS:H | 12 | 0.14 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD21 | 1:A:80:LYS:H | 12 | 0.14 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD22 | 1:A:80:LYS:H | 12 | 0.14 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD23 | 1:A:80:LYS:H | 12 | 0.14 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB1 | 12 | 0.14 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB2 | 12 | 0.14 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB3 | 12 | 0.14 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB1 | 18 | 0.14 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB2 | 18 | 0.14 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB3 | 18 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 3 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 3 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 3 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 3 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 3 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 3 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 7 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 7 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 7 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 7 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 7 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 7 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 10 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 10 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 10 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 10 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 10 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 10 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 12 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 12 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 12 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 12 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 12 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 12 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 14 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 14 | 0.14 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 14 | 0.14 |
| (1,1620) | 1:A:59:SER:HB2 | 1:A:60:CYS:H | 1 | 0.14 |
| (1,1620) | 1:A:59:SER:HB3 | 1:A:60:CYS:H | 1 | 0.14 |
| (1,1620) | 1:A:59:SER:HB2 | 1:A:60:CYS:H | 18 | 0.14 |
| (1,1620) | 1:A:59:SER:HB3 | 1:A:60:CYS:H | 18 | 0.14 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 14 | 0.14 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 14 | 0.14 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 14 | 0.14 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 14 | 0.14 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 14 | 0.14 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 14 | 0.14 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 15 | 0.14 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 15 | 0.14 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 15 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 15 | 0.14 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 15 | 0.14 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 15 | 0.14 |
| (1,160) | 1:A:79:TYR:H | 1:A:80:LYS:HG3 | 7 | 0.14 |
| (1,160) | 1:A:79:TYR:H | 1:A:80:LYS:HG3 | 14 | 0.14 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG2 | 15 | 0.14 |
| (1,1582) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HG3 | 15 | 0.14 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 3 | 0.14 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 3 | 0.14 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD2 | 16 | 0.14 |
| (1,1515) | 1:A:33:LYS:H | 1:A:33:LYS:HD3 | 16 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 17 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 17 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 17 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 17 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 17 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 17 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 17 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 17 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 17 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 17 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 17 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 17 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 17 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 17 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 17 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 17 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 17 | 0.14 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 17 | 0.14 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE2 | 8 | 0.14 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE3 | 8 | 0.14 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE2 | 9 | 0.14 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE3 | 9 | 0.14 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE2 | 18 | 0.14 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE3 | 18 | 0.14 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE2 | 15 | 0.14 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE3 | 15 | 0.14 |
| (1,1413) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HE2 | 5 | 0.14 |
| (1,1413) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HE3 | 5 | 0.14 |
| (1,1413) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HE2 | 11 | 0.14 |
| (1,1413) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:13:LYS:HE3 | 11 | 0.14 |
| (1,1394) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:8:HIS:HB2 | 8 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1394) | 1:A:7:LEU:HA | 1:A:8:HIS:HB3 | 8 | 0.14 |
| (1,1359) | 1:A:83:ALA:HA | 1:A:84:LYS:H | 14 | 0.14 |
| (1,1338) | 1:A:89:HIS:H | 1:A:90:PRO:HA | 3 | 0.14 |
| (1,1338) | 1:A:89:HIS:H | 1:A:90:PRO:HA | 6 | 0.14 |
| (1,1281) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:43:LEU:H | 3 | 0.14 |
| (1,1281) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:43:LEU:H | 15 | 0.14 |
| (1,1262) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HA | 2 | 0.14 |
| (1,1250) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:68:ASN:HD21 | 13 | 0.14 |
| (1,1227) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:ASN:HA | 1 | 0.14 |
| (1,1227) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:ASN:HA | 2 | 0.14 |
| (1,1227) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:ASN:HA | 8 | 0.14 |
| (1,1220) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:81:ILE:H | 12 | 0.14 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 1 | 0.14 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 7 | 0.14 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 11 | 0.14 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 18 | 0.14 |
| (1,1191) | 1:A:76:LEU:HD11 | 1:A:79:TYR:HD1 | 4 | 0.14 |
| (1,1191) | 1:A:76:LEU:HD12 | 1:A:79:TYR:HD1 | 4 | 0.14 |
| (1,1191) | 1:A:76:LEU:HD13 | 1:A:79:TYR:HD1 | 4 | 0.14 |
| (1,1186) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HA | 8 | 0.14 |
| (1,1186) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HA | 15 | 0.14 |
| (1,1163) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:79:TYR:HE2 | 17 | 0.14 |
| (1,1149) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:82:ASN:HA | 4 | 0.14 |
| (1,1111) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HA | 9 | 0.14 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:71:ALA:HA | 1 | 0.14 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:71:ALA:HA | 1 | 0.14 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:71:ALA:HA | 1 | 0.14 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:71:ALA:HA | 9 | 0.14 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:71:ALA:HA | 9 | 0.14 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:71:ALA:HA | 9 | 0.14 |
| (1,1100) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:58:ALA:HA | 4 | 0.14 |
| (1,1081) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HA | 11 | 0.14 |
| (1,1064) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:85:LEU:HG | 2 | 0.14 |
| (1,1064) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:85:LEU:HG | 3 | 0.14 |
| (1,1064) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:85:LEU:HG | 4 | 0.14 |
| (1,1055) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:66:MET:HG3 | 8 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HA | 9 | 0.14 |
| (1,1047) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HA | 16 | 0.14 |
| (1,1021) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HB | 14 | 0.14 |
| (1,1008) | 1:A:34:HIS:HB3 | 1:A:35:LEU:HA | 18 | 0.14 |
| (1,1007) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 1 | 0.14 |
| (1,1007) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:34:HIS:HB2 | 9 | 0.14 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG21 | 4 | 0.13 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG22 | 4 | 0.13 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG23 | 4 | 0.13 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG21 | 7 | 0.13 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG22 | 7 | 0.13 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG23 | 7 | 0.13 |
| (1,986) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:HA | 17 | 0.13 |
| (1,974) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 2 | 0.13 |
| (1,974) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 15 | 0.13 |
| (1,958) | 1:A:69:ASN:HB2 | 1:A:70:ALA:HA | 17 | 0.13 |
| (1,93) | 1:A:85:LEU:HG | 1:A:86:CYS:H | 6 | 0.13 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE1 | 10 | 0.13 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE2 | 10 | 0.13 |
| (1,929) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:66:MET:HE3 | 10 | 0.13 |
| (1,928) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:54:ASN:HB3 | 9 | 0.13 |
| (1,925) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:55:GLU:HA | 4 | 0.13 |
| (1,924) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:27:MET:HG3 | 13 | 0.13 |
| (1,921) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG2 | 2 | 0.13 |
| (1,884) | 1:A:77:GLU:HG2 | 1:A:78:LEU:HA | 10 | 0.13 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB1 | 15 | 0.13 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB2 | 15 | 0.13 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB3 | 15 | 0.13 |
| (1,87) | 1:A:53:THR:HG21 | 1:A:54:ASN:H | 3 | 0.13 |
| (1,87) | 1:A:53:THR:HG22 | 1:A:54:ASN:H | 3 | 0.13 |
| (1,87) | 1:A:53:THR:HG23 | 1:A:54:ASN:H | 3 | 0.13 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:46:GLY:H | 5 | 0.13 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:46:GLY:H | 5 | 0.13 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:46:GLY:H | 5 | 0.13 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:46:GLY:H | 6 | 0.13 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:46:GLY:H | 6 | 0.13 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:46:GLY:H | 6 | 0.13 |
| (1,854) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HB3 | 8 | 0.13 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 7 | 0.13 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 7 | 0.13 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 7 | 0.13 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 8 | 0.13 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 8 | 0.13 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 8 | 0.13 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG21 | 12 | 0.13 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG22 | 12 | 0.13 |
| (1,837) | 1:A:80:LYS:HB2 | 1:A:81:ILE:HG23 | 12 | 0.13 |
| (1,833) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HB | 2 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,833) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HB | 2 | 0.13 |
| (1,833) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HB | 2 | 0.13 |
| (1,827) | 1:A:65:ARG:HG2 | 1:A:66:MET:HG2 | 3 | 0.13 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG21 | 4 | 0.13 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG22 | 4 | 0.13 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG23 | 4 | 0.13 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG21 | 8 | 0.13 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG22 | 8 | 0.13 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG23 | 8 | 0.13 |
| (1,791) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 1 | 0.13 |
| (1,791) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 16 | 0.13 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:71:ALA:HA | 4 | 0.13 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 4 | 0.13 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:71:ALA:HA | 4 | 0.13 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:71:ALA:HA | 5 | 0.13 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 5 | 0.13 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:71:ALA:HA | 5 | 0.13 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:71:ALA:HA | 12 | 0.13 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 12 | 0.13 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:71:ALA:HA | 12 | 0.13 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:71:ALA:HA | 19 | 0.13 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 19 | 0.13 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:71:ALA:HA | 19 | 0.13 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 9 | 0.13 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 9 | 0.13 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 9 | 0.13 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 13 | 0.13 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 13 | 0.13 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 13 | 0.13 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 17 | 0.13 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 17 | 0.13 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 17 | 0.13 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB1 | 13 | 0.13 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB2 | 13 | 0.13 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB3 | 13 | 0.13 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 4 | 0.13 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 4 | 0.13 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 4 | 0.13 |
| (1,730) | 1:A:85:LEU:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 16 | 0.13 |
| (1,717) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HG13 | 8 | 0.13 |
| (1,690) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HA | 7 | 0.13 |
| (1,690) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HA | 16 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,687) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HA | 4 | 0.13 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HD3 | 8 | 0.13 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HD3 | 8 | 0.13 |
| (1,686) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HD3 | 8 | 0.13 |
| (1,680) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HG21 | 20 | 0.13 |
| (1,680) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HG22 | 20 | 0.13 |
| (1,680) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HG23 | 20 | 0.13 |
| (1,679) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:23:GLU:HA | 15 | 0.13 |
| (1,679) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:23:GLU:HA | 15 | 0.13 |
| (1,679) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:23:GLU:HA | 15 | 0.13 |
| (1,674) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD11 | 11 | 0.13 |
| (1,674) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD12 | 11 | 0.13 |
| (1,674) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD13 | 11 | 0.13 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG21 | 6 | 0.13 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG22 | 6 | 0.13 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG23 | 6 | 0.13 |
| (1,655) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 5 | 0.13 |
| (1,655) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 11 | 0.13 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB1 | 1:A:59:SER:HA | 13 | 0.13 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB2 | 1:A:59:SER:HA | 13 | 0.13 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB3 | 1:A:59:SER:HA | 13 | 0.13 |
| (1,640) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:83:ALA:HA | 20 | 0.13 |
| (1,640) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:83:ALA:HA | 20 | 0.13 |
| (1,640) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:83:ALA:HA | 20 | 0.13 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:HA | 7 | 0.13 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:HA | 7 | 0.13 |
| (1,633) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:HA | 7 | 0.13 |
| (1,625) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HB3 | 13 | 0.13 |
| (1,625) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HB3 | 14 | 0.13 |
| (1,56) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:23:GLU:H | 13 | 0.13 |
| (1,56) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:23:GLU:H | 13 | 0.13 |
| (1,56) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:23:GLU:H | 13 | 0.13 |
| (1,56) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:23:GLU:H | 18 | 0.13 |
| (1,56) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:23:GLU:H | 18 | 0.13 |
| (1,56) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:23:GLU:H | 18 | 0.13 |
| (1,546) | 1:A:70:ALA:H | 1:A:72:ALA:H | 12 | 0.13 |
| (1,544) | 1:A:15:GLY:H | 1:A:16:GLU:H | 1 | 0.13 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:24:ALA:H | 5 | 0.13 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:24:ALA:H | 5 | 0.13 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:24:ALA:H | 5 | 0.13 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:24:ALA:H | 13 | 0.13 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:24:ALA:H | 13 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:24:ALA:H | 13 | 0.13 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:24:ALA:H | 14 | 0.13 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:24:ALA:H | 14 | 0.13 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:24:ALA:H | 14 | 0.13 |
| (1,513) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:H | 4 | 0.13 |
| (1,513) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:H | 11 | 0.13 |
| (1,509) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:56:PHE:H | 7 | 0.13 |
| (1,509) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:56:PHE:H | 8 | 0.13 |
| (1,509) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:56:PHE:H | 9 | 0.13 |
| (1,509) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:56:PHE:H | 12 | 0.13 |
| (1,506) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:CYS:H | 8 | 0.13 |
| (1,505) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:52:CYS:H | 14 | 0.13 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 9 | 0.13 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 14 | 0.13 |
| (1,481) | 1:A:79:TYR:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 7 | 0.13 |
| (1,47) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:82:ASN:HD21 | 17 | 0.13 |
| (1,47) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:82:ASN:HD21 | 17 | 0.13 |
| (1,47) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:82:ASN:HD21 | 17 | 0.13 |
| (1,464) | 1:A:40:TYR:HD1 | 1:A:41:HIS:H | 12 | 0.13 |
| (1,461) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:83:ALA:H | 5 | 0.13 |
| (1,454) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:H | 16 | 0.13 |
| (1,450) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:23:GLU:H | 9 | 0.13 |
| (1,447) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:18:GLN:H | 18 | 0.13 |
| (1,440) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HA | 18 | 0.13 |
| (1,421) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:25:SER:H | 5 | 0.13 |
| (1,41) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:78:LEU:HG | 13 | 0.13 |
| (1,405) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:65:ARG:HA | 7 | 0.13 |
| (1,405) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:65:ARG:HA | 10 | 0.13 |
| (1,405) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:65:ARG:HA | 14 | 0.13 |
| (1,400) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:75:ALA:H | 8 | 0.13 |
| (1,400) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:75:ALA:H | 14 | 0.13 |
| (1,399) | 1:A:26:ARG:HA | 1:A:28:LYS:H | 4 | 0.13 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 4 | 0.13 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 9 | 0.13 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 10 | 0.13 |
| (1,326) | 1:A:82:ASN:HB2 | 1:A:83:ALA:H | 4 | 0.13 |
| (1,324) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:H | 13 | 0.13 |
| (1,319) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:86:CYS:HB2 | 14 | 0.13 |
| (1,319) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:86:CYS:HB2 | 20 | 0.13 |
| (1,318) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:52:CYS:HB2 | 19 | 0.13 |
| (1,307) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:47:CYS:HB2 | 2 | 0.13 |
| (1,300) | 1:A:63:PHE:H | 1:A:63:PHE:HB3 | 17 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:H | 5 | 0.13 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:H | 5 | 0.13 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:H | 5 | 0.13 |
| (1,277) | 1:A:49:ASN:HB3 | 1:A:52:CYS:H | 16 | 0.13 |
| (1,271) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:55:GLU:H | 1 | 0.13 |
| (1,251) | 1:A:52:CYS:HB3 | 1:A:60:CYS:H | 1 | 0.13 |
| (1,243) | 1:A:37:GLU:HB2 | 1:A:39:TYR:H | 1 | 0.13 |
| (1,243) | 1:A:37:GLU:HB2 | 1:A:39:TYR:H | 2 | 0.13 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:H | 6 | 0.13 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:H | 6 | 0.13 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:H | 6 | 0.13 |
| (1,226) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:77:GLU:HB3 | 6 | 0.13 |
| (1,217) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:62:THR:H | 13 | 0.13 |
| (1,214) | 1:A:61:PRO:HG3 | 1:A:63:PHE:H | 11 | 0.13 |
| (1,212) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:67:ASP:H | 5 | 0.13 |
| (1,21) | 1:A:78:LEU:HB3 | 1:A:80:LYS:H | 9 | 0.13 |
| (1,185) | 1:A:16:GLU:H | 1:A:16:GLU:HB3 | 18 | 0.13 |
| (1,180) | 1:A:88:PRO:HB2 | 1:A:89:HIS:H | 19 | 0.13 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG2 | 15 | 0.13 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HG3 | 15 | 0.13 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG2 | 15 | 0.13 |
| (1,1712) | 1:A:87:ASP:HB3 | 1:A:88:PRO:HG3 | 15 | 0.13 |
| (1,1710) | 1:A:87:ASP:H | 1:A:87:ASP:HB2 | 5 | 0.13 |
| (1,1710) | 1:A:87:ASP:H | 1:A:87:ASP:HB3 | 5 | 0.13 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB1 | 1:A:84:LYS:HD2 | 13 | 0.13 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB1 | 1:A:84:LYS:HD3 | 13 | 0.13 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB2 | 1:A:84:LYS:HD2 | 13 | 0.13 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB2 | 1:A:84:LYS:HD3 | 13 | 0.13 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB3 | 1:A:84:LYS:HD2 | 13 | 0.13 |
| (1,1694) | 1:A:83:ALA:HB3 | 1:A:84:LYS:HD3 | 13 | 0.13 |
| (1,1682) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 6 | 0.13 |
| (1,1682) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 6 | 0.13 |
| (1,1682) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HE2 | 9 | 0.13 |
| (1,1682) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HE3 | 9 | 0.13 |
| (1,168) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 9 | 0.13 |
| (1,168) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 10 | 0.13 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD11 | 1:A:80:LYS:H | 5 | 0.13 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD12 | 1:A:80:LYS:H | 5 | 0.13 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD13 | 1:A:80:LYS:H | 5 | 0.13 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD21 | 1:A:80:LYS:H | 5 | 0.13 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD22 | 1:A:80:LYS:H | 5 | 0.13 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD23 | 1:A:80:LYS:H | 5 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|---------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB1 | 11 | 0.13 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB2 | 11 | 0.13 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB3 | 11 | 0.13 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB1 | 13 | 0.13 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB2 | 13 | 0.13 |
| (1,167) | 1:A:74:LYS:H | 1:A:75:ALA:HB3 | 13 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 5 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 5 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 5 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 5 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 5 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 5 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 8 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 8 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 8 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 8 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 8 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 8 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 13 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 13 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 13 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 13 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 13 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 13 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 15 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 15 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 15 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 15 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 15 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 15 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 17 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 17 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 17 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 17 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 17 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 17 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 18 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 18 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 18 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 18 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 18 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 18 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 20 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 20 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 20 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 20 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 20 | 0.13 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 20 | 0.13 |
| (1,1609) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:59:SER:HB2 | 7 | 0.13 |
| (1,1609) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:59:SER:HB3 | 7 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG2 | 8 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG3 | 8 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG2 | 15 | 0.13 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG3 | 15 | 0.13 |
| (1,154) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:57:CYS:H | 3 | 0.13 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD11 | 1:A:38:ARG:HD2 | 14 | 0.13 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD11 | 1:A:38:ARG:HD3 | 14 | 0.13 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:38:ARG:HD2 | 14 | 0.13 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:38:ARG:HD3 | 14 | 0.13 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:38:ARG:HD2 | 14 | 0.13 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:38:ARG:HD3 | 14 | 0.13 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD21 | 1:A:38:ARG:HD2 | 14 | 0.13 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD21 | 1:A:38:ARG:HD3 | 14 | 0.13 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:38:ARG:HD2 | 14 | 0.13 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD22 | 1:A:38:ARG:HD3 | 14 | 0.13 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:38:ARG:HD2 | 14 | 0.13 |
| (1,1534) | 1:A:35:LEU:HD23 | 1:A:38:ARG:HD3 | 14 | 0.13 |
| (1,1521) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:34:HIS:HA | 10 | 0.13 |
| (1,1521) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:34:HIS:HA | 10 | 0.13 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE2 | 2 | 0.13 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE3 | 2 | 0.13 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE2 | 2 | 0.13 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE3 | 2 | 0.13 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE2 | 3 | 0.13 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE3 | 3 | 0.13 |
| (1,1495) | 1:A:28:LYS:H | 1:A:28:LYS:HG2 | 12 | 0.13 |
| (1,1495) | 1:A:28:LYS:H | 1:A:28:LYS:HG3 | 12 | 0.13 |
| (1,1491) | 1:A:26:ARG:HD2 | 1:A:27:MET:H | 12 | 0.13 |
| (1,1491) | 1:A:26:ARG:HD3 | 1:A:27:MET:H | 12 | 0.13 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD11 | 11 | 0.13 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD12 | 11 | 0.13 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD13 | 11 | 0.13 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD11 | 11 | 0.13 |
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD12 | 11 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1452) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD13 | 11 | 0.13 |
| (1,1439) | 1:A:18:GLN:HB2 | 1:A:19:SER:H | 4 | 0.13 |
| (1,1439) | 1:A:18:GLN:HB3 | 1:A:19:SER:H | 4 | 0.13 |
| (1,1422) | 1:A:14:SER:HB2 | 1:A:16:GLU:H | 9 | 0.13 |
| (1,1422) | 1:A:14:SER:HB3 | 1:A:16:GLU:H | 9 | 0.13 |
| (1,1416) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:14:SER:HA | 19 | 0.13 |
| (1,1416) | 1:A:13:LYS:HB3 | 1:A:14:SER:HA | 19 | 0.13 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB2 | 18 | 0.13 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB3 | 18 | 0.13 |
| (1,1388) | 1:A:6:LYS:HB2 | 1:A:7:LEU:H | 14 | 0.13 |
| (1,1388) | 1:A:6:LYS:HB3 | 1:A:7:LEU:H | 14 | 0.13 |
| (1,1340) | 1:A:84:LYS:HG3 | 1:A:85:LEU:H | 18 | 0.13 |
| (1,1299) | 1:A:4:MET:HE1 | 1:A:6:LYS:H | 15 | 0.13 |
| (1,1299) | 1:A:4:MET:HE2 | 1:A:6:LYS:H | 15 | 0.13 |
| (1,1299) | 1:A:4:MET:HE3 | 1:A:6:LYS:H | 15 | 0.13 |
| (1,1281) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:43:LEU:H | 14 | 0.13 |
| (1,1246) | 1:A:54:ASN:HA | 1:A:56:PHE:H | 11 | 0.13 |
| (1,1240) | 1:A:52:CYS:H | 1:A:60:CYS:HA | 14 | 0.13 |
| (1,1227) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:ASN:HA | 17 | 0.13 |
| (1,1220) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:81:ILE:H | 15 | 0.13 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 12 | 0.13 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 16 | 0.13 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 19 | 0.13 |
| (1,1202) | 1:A:76:LEU:HG | 1:A:77:GLU:H | 19 | 0.13 |
| (1,1186) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HA | 12 | 0.13 |
| (1,1186) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HA | 16 | 0.13 |
| (1,1171) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:H | 12 | 0.13 |
| (1,1151) | 1:A:11:TYR:HA | 1:A:11:TYR:HE1 | 15 | 0.13 |
| (1,1113) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:4:MET:HE1 | 14 | 0.13 |
| (1,1113) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:4:MET:HE2 | 14 | 0.13 |
| (1,1113) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:4:MET:HE3 | 14 | 0.13 |
| (1,1111) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HA | 15 | 0.13 |
| (1,1100) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:58:ALA:HA | 8 | 0.13 |
| (1,1100) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:58:ALA:HA | 11 | 0.13 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 14 | 0.13 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 14 | 0.13 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 14 | 0.13 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 9 | 0.13 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 9 | 0.13 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 9 | 0.13 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 16 | 0.13 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 16 | 0.13 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 16 | 0.13 |
| (1,1080) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:74:LYS:HE3 | 2 | 0.13 |
| (1,1080) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:74:LYS:HE3 | 5 | 0.13 |
| (1,1080) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:74:LYS:HE3 | 17 | 0.13 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 14 | 0.13 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 14 | 0.13 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 14 | 0.13 |
| (1,1047) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HA | 3 | 0.13 |
| (1,1040) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HD3 | 7 | 0.13 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:75:ALA:HA | 1 | 0.13 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:75:ALA:HA | 1 | 0.13 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:75:ALA:HA | 1 | 0.13 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:75:ALA:HA | 8 | 0.13 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:75:ALA:HA | 8 | 0.13 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:75:ALA:HA | 8 | 0.13 |
| (1,1029) | 1:A:89:HIS:HA | 1:A:90:PRO:HD2 | 16 | 0.13 |
| (1,1021) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HB | 1 | 0.13 |
| (1,1008) | 1:A:34:HIS:HB3 | 1:A:35:LEU:HA | 2 | 0.13 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG21 | 6 | 0.12 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG22 | 6 | 0.12 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG23 | 6 | 0.12 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG21 | 9 | 0.12 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG22 | 9 | 0.12 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG23 | 9 | 0.12 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG21 | 11 | 0.12 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG22 | 11 | 0.12 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG23 | 11 | 0.12 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG21 | 13 | 0.12 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG22 | 13 | 0.12 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG23 | 13 | 0.12 |
| (1,986) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:HA | 9 | 0.12 |
| (1,986) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:HA | 15 | 0.12 |
| (1,985) | 1:A:79:TYR:HB2 | 1:A:80:LYS:HA | 4 | 0.12 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB1 | 9 | 0.12 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB2 | 9 | 0.12 |
| (1,97) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HB3 | 9 | 0.12 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HE3 | 9 | 0.12 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HE3 | 9 | 0.12 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HE3 | 9 | 0.12 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 1 | 0.12 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 1 | 0.12 |
| (1,966) | 1:A:42:GLN:HG2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 1 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB1 | 1:A:27:MET:HG2 | 3 | 0.12 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 3 | 0.12 |
| (1,951) | 1:A:24:ALA:HB3 | 1:A:27:MET:HG2 | 3 | 0.12 |
| (1,947) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HG3 | 15 | 0.12 |
| (1,93) | 1:A:85:LEU:HG | 1:A:86:CYS:H | 8 | 0.12 |
| (1,925) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:55:GLU:HA | 15 | 0.12 |
| (1,925) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:55:GLU:HA | 17 | 0.12 |
| (1,900) | 1:A:87:ASP:HA | 1:A:88:PRO:HB3 | 4 | 0.12 |
| (1,884) | 1:A:77:GLU:HG2 | 1:A:78:LEU:HA | 11 | 0.12 |
| (1,884) | 1:A:77:GLU:HG2 | 1:A:78:LEU:HA | 16 | 0.12 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB1 | 11 | 0.12 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB2 | 11 | 0.12 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB3 | 11 | 0.12 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG21 | 14 | 0.12 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG22 | 14 | 0.12 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG23 | 14 | 0.12 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG21 | 18 | 0.12 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG22 | 18 | 0.12 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG23 | 18 | 0.12 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG21 | 19 | 0.12 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG22 | 19 | 0.12 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG23 | 19 | 0.12 |
| (1,870) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 8 | 0.12 |
| (1,865) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:66:MET:HB2 | 2 | 0.12 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:46:GLY:H | 13 | 0.12 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:46:GLY:H | 13 | 0.12 |
| (1,86) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:46:GLY:H | 13 | 0.12 |
| (1,854) | 1:A:49:ASN:HA | 1:A:50:GLU:HB3 | 7 | 0.12 |
| (1,840) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:HA | 15 | 0.12 |
| (1,833) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HB | 9 | 0.12 |
| (1,833) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HB | 9 | 0.12 |
| (1,833) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HB | 9 | 0.12 |
| (1,831) | 1:A:84:LYS:HB3 | 1:A:85:LEU:HA | 18 | 0.12 |
| (1,824) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:65:ARG:HB3 | 6 | 0.12 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD11 | 12 | 0.12 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD12 | 12 | 0.12 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD13 | 12 | 0.12 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB1 | 1:A:78:LEU:HB2 | 18 | 0.12 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB2 | 1:A:78:LEU:HB2 | 18 | 0.12 |
| (1,792) | 1:A:75:ALA:HB3 | 1:A:78:LEU:HB2 | 18 | 0.12 |
| (1,791) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 8 | 0.12 |
| (1,791) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 19 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,788) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:HB1 | 16 | 0.12 |
| (1,788) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:HB2 | 16 | 0.12 |
| (1,788) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:HB3 | 16 | 0.12 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:71:ALA:HA | 10 | 0.12 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 10 | 0.12 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:71:ALA:HA | 10 | 0.12 |
| (1,783) | 1:A:68:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 6 | 0.12 |
| (1,783) | 1:A:68:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 6 | 0.12 |
| (1,783) | 1:A:68:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 6 | 0.12 |
| (1,783) | 1:A:68:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 18 | 0.12 |
| (1,783) | 1:A:68:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 18 | 0.12 |
| (1,783) | 1:A:68:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 18 | 0.12 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 15 | 0.12 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,780) | 1:A:69:ASN:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 15 | 0.12 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB1 | 1 | 0.12 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB2 | 1 | 0.12 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB3 | 1 | 0.12 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 14 | 0.12 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 14 | 0.12 |
| (1,756) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HB1 | 2 | 0.12 |
| (1,756) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HB2 | 2 | 0.12 |
| (1,756) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HB3 | 2 | 0.12 |
| (1,756) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HB1 | 18 | 0.12 |
| (1,756) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HB2 | 18 | 0.12 |
| (1,756) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:71:ALA:HB3 | 18 | 0.12 |
| (1,752) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:80:LYS:HG2 | 18 | 0.12 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB1 | 7 | 0.12 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB2 | 7 | 0.12 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB3 | 7 | 0.12 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 5 | 0.12 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 5 | 0.12 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 5 | 0.12 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 12 | 0.12 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 12 | 0.12 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 12 | 0.12 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 17 | 0.12 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 17 | 0.12 |
| (1,745) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 17 | 0.12 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB1 | 13 | 0.12 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB2 | 13 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB3 | 13 | 0.12 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB1 | 16 | 0.12 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB2 | 16 | 0.12 |
| (1,741) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:71:ALA:HB3 | 16 | 0.12 |
| (1,739) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 15 | 0.12 |
| (1,739) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 15 | 0.12 |
| (1,739) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 15 | 0.12 |
| (1,730) | 1:A:85:LEU:HB3 | 1:A:86:CYS:HA | 7 | 0.12 |
| (1,724) | 1:A:85:LEU:HG | 1:A:86:CYS:HA | 1 | 0.12 |
| (1,724) | 1:A:85:LEU:HG | 1:A:86:CYS:HA | 15 | 0.12 |
| (1,717) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HG13 | 5 | 0.12 |
| (1,717) | 1:A:70:ALA:HA | 1:A:73:ILE:HG13 | 13 | 0.12 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG21 | 14 | 0.12 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG22 | 14 | 0.12 |
| (1,701) | 1:A:61:PRO:HB3 | 1:A:62:THR:HG23 | 14 | 0.12 |
| (1,690) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:75:ALA:HA | 3 | 0.12 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG21 | 1:A:63:PHE:H | 2 | 0.12 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG22 | 1:A:63:PHE:H | 2 | 0.12 |
| (1,69) | 1:A:62:THR:HG23 | 1:A:63:PHE:H | 2 | 0.12 |
| (1,683) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HG21 | 7 | 0.12 |
| (1,683) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HG22 | 7 | 0.12 |
| (1,683) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HG23 | 7 | 0.12 |
| (1,683) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HG21 | 7 | 0.12 |
| (1,683) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HG22 | 7 | 0.12 |
| (1,683) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HG23 | 7 | 0.12 |
| (1,683) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HG21 | 7 | 0.12 |
| (1,683) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HG22 | 7 | 0.12 |
| (1,683) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HG23 | 7 | 0.12 |
| (1,682) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 17 | 0.12 |
| (1,682) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 17 | 0.12 |
| (1,682) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 17 | 0.12 |
| (1,674) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD11 | 6 | 0.12 |
| (1,674) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD12 | 6 | 0.12 |
| (1,674) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HD13 | 6 | 0.12 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD11 | 4 | 0.12 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD12 | 4 | 0.12 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD13 | 4 | 0.12 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB1 | 1:A:59:SER:HA | 17 | 0.12 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB2 | 1:A:59:SER:HA | 17 | 0.12 |
| (1,643) | 1:A:58:ALA:HB3 | 1:A:59:SER:HA | 17 | 0.12 |
| (1,625) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HB3 | 18 | 0.12 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD11 | 1 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD12 | 1 | 0.12 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD13 | 1 | 0.12 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD11 | 6 | 0.12 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD12 | 6 | 0.12 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD13 | 6 | 0.12 |
| (1,565) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:51:ALA:H | 6 | 0.12 |
| (1,565) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:51:ALA:H | 19 | 0.12 |
| (1,545) | 1:A:16:GLU:H | 1:A:18:GLN:H | 9 | 0.12 |
| (1,525) | 1:A:11:TYR:H | 1:A:12:TRP:H | 3 | 0.12 |
| (1,525) | 1:A:11:TYR:H | 1:A:12:TRP:H | 9 | 0.12 |
| (1,513) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:H | 20 | 0.12 |
| (1,509) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:56:PHE:H | 3 | 0.12 |
| (1,509) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:56:PHE:H | 4 | 0.12 |
| (1,506) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:CYS:H | 12 | 0.12 |
| (1,506) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:CYS:H | 17 | 0.12 |
| (1,506) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:CYS:H | 20 | 0.12 |
| (1,504) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:12:TRP:HZ2 | 8 | 0.12 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 7 | 0.12 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 15 | 0.12 |
| (1,483) | 1:A:78:LEU:H | 1:A:79:TYR:HD1 | 17 | 0.12 |
| (1,482) | 1:A:39:TYR:H | 1:A:39:TYR:HD1 | 17 | 0.12 |
| (1,470) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 2 | 0.12 |
| (1,470) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:79:TYR:HE2 | 10 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:82:ASN:HD21 | 8 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:82:ASN:HD21 | 8 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:82:ASN:HD21 | 8 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:81:ILE:HG21 | 1:A:82:ASN:HD21 | 12 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:81:ILE:HG22 | 1:A:82:ASN:HD21 | 12 | 0.12 |
| (1,47) | 1:A:81:ILE:HG23 | 1:A:82:ASN:HD21 | 12 | 0.12 |
| (1,463) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:79:TYR:H | 1 | 0.12 |
| (1,463) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:79:TYR:H | 16 | 0.12 |
| (1,463) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:79:TYR:H | 20 | 0.12 |
| (1,462) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:82:ASN:H | 20 | 0.12 |
| (1,455) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:H | 20 | 0.12 |
| (1,454) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:H | 18 | 0.12 |
| (1,440) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HA | 6 | 0.12 |
| (1,426) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:60:CYS:H | 2 | 0.12 |
| (1,424) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:13:LYS:HA | 14 | 0.12 |
| (1,424) | 1:A:12:TRP:H | 1:A:13:LYS:HA | 20 | 0.12 |
| (1,421) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:25:SER:H | 9 | 0.12 |
| (1,41) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:78:LEU:HG | 18 | 0.12 |
| (1,41) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:78:LEU:HG | 19 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,400) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:75:ALA:H | 4 | 0.12 |
| (1,399) | 1:A:26:ARG:HA | 1:A:28:LYS:H | 12 | 0.12 |
| (1,391) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:88:PRO:HD3 | 6 | 0.12 |
| (1,389) | 1:A:42:GLN:HA | 1:A:58:ALA:H | 18 | 0.12 |
| (1,359) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HB2 | 3 | 0.12 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 3 | 0.12 |
| (1,311) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:H | 14 | 0.12 |
| (1,300) | 1:A:63:PHE:H | 1:A:63:PHE:HB3 | 16 | 0.12 |
| (1,293) | 1:A:69:ASN:HB2 | 1:A:71:ALA:H | 1 | 0.12 |
| (1,28) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:HB1 | 14 | 0.12 |
| (1,28) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:HB2 | 14 | 0.12 |
| (1,28) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:HB3 | 14 | 0.12 |
| (1,275) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:57:CYS:H | 19 | 0.12 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:71:ALA:H | 11 | 0.12 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:71:ALA:H | 11 | 0.12 |
| (1,24) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:71:ALA:H | 11 | 0.12 |
| (1,239) | 1:A:61:PRO:HG2 | 1:A:63:PHE:H | 18 | 0.12 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:72:ALA:H | 5 | 0.12 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:72:ALA:H | 5 | 0.12 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:72:ALA:H | 5 | 0.12 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:72:ALA:H | 11 | 0.12 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:72:ALA:H | 11 | 0.12 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:72:ALA:H | 11 | 0.12 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:72:ALA:H | 14 | 0.12 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:72:ALA:H | 14 | 0.12 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:72:ALA:H | 14 | 0.12 |
| (1,226) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:77:GLU:HB3 | 3 | 0.12 |
| (1,220) | 1:A:25:SER:H | 1:A:27:MET:HE1 | 5 | 0.12 |
| (1,220) | 1:A:25:SER:H | 1:A:27:MET:HE2 | 5 | 0.12 |
| (1,220) | 1:A:25:SER:H | 1:A:27:MET:HE3 | 5 | 0.12 |
| (1,212) | 1:A:66:MET:HB3 | 1:A:67:ASP:H | 20 | 0.12 |
| (1,1677) | 1:A:76:LEU:HD11 | 1:A:79:TYR:HE1 | 3 | 0.12 |
| (1,1677) | 1:A:76:LEU:HD12 | 1:A:79:TYR:HE1 | 3 | 0.12 |
| (1,1677) | 1:A:76:LEU:HD13 | 1:A:79:TYR:HE1 | 3 | 0.12 |
| (1,1677) | 1:A:76:LEU:HD21 | 1:A:79:TYR:HE1 | 3 | 0.12 |
| (1,1677) | 1:A:76:LEU:HD22 | 1:A:79:TYR:HE1 | 3 | 0.12 |
| (1,1677) | 1:A:76:LEU:HD23 | 1:A:79:TYR:HE1 | 3 | 0.12 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 19 | 0.12 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 19 | 0.12 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 19 | 0.12 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 19 | 0.12 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 19 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 19 | 0.12 |
| (1,1633) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:HG2 | 2 | 0.12 |
| (1,1633) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:HG2 | 2 | 0.12 |
| (1,1633) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:HG2 | 2 | 0.12 |
| (1,1633) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HG2 | 2 | 0.12 |
| (1,1633) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HG2 | 2 | 0.12 |
| (1,1633) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HG2 | 2 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 4 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 4 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 4 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 4 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 4 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 4 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 6 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 6 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 6 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 6 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 6 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 6 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 9 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 9 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 9 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 9 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 9 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 9 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 11 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 11 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 11 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 11 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 11 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 11 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 19 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 19 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 19 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 19 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 19 | 0.12 |
| (1,1628) | 1:A:64:LEU:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 19 | 0.12 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.12 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.12 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.12 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 16 | 0.12 |
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 16 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1626) | 1:A:63:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 16 | 0.12 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB2 | 17 | 0.12 |
| (1,1610) | 1:A:53:THR:HA | 1:A:60:CYS:HB3 | 17 | 0.12 |
| (1,1592) | 1:A:45:GLU:HA | 1:A:45:GLU:HG2 | 2 | 0.12 |
| (1,1592) | 1:A:45:GLU:HA | 1:A:45:GLU:HG3 | 2 | 0.12 |
| (1,1592) | 1:A:45:GLU:HA | 1:A:45:GLU:HG2 | 11 | 0.12 |
| (1,1592) | 1:A:45:GLU:HA | 1:A:45:GLU:HG3 | 11 | 0.12 |
| (1,1592) | 1:A:45:GLU:HA | 1:A:45:GLU:HG2 | 15 | 0.12 |
| (1,1592) | 1:A:45:GLU:HA | 1:A:45:GLU:HG3 | 15 | 0.12 |
| (1,1588) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:45:GLU:HG2 | 14 | 0.12 |
| (1,1588) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:45:GLU:HG3 | 14 | 0.12 |
| (1,1588) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:45:GLU:HG2 | 14 | 0.12 |
| (1,1588) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:45:GLU:HG3 | 14 | 0.12 |
| (1,1588) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:45:GLU:HG2 | 14 | 0.12 |
| (1,1588) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:45:GLU:HG3 | 14 | 0.12 |
| (1,1580) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:87:ASP:HB2 | 2 | 0.12 |
| (1,1580) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:87:ASP:HB3 | 2 | 0.12 |
| (1,1580) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:87:ASP:HB2 | 6 | 0.12 |
| (1,1580) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:87:ASP:HB3 | 6 | 0.12 |
| (1,1580) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:87:ASP:HB2 | 17 | 0.12 |
| (1,1580) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:87:ASP:HB3 | 17 | 0.12 |
| (1,1554) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:85:LEU:HD11 | 5 | 0.12 |
| (1,1554) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:85:LEU:HD12 | 5 | 0.12 |
| (1,1554) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:85:LEU:HD13 | 5 | 0.12 |
| (1,1554) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:85:LEU:HD21 | 5 | 0.12 |
| (1,1554) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:85:LEU:HD22 | 5 | 0.12 |
| (1,1554) | 1:A:38:ARG:H | 1:A:85:LEU:HD23 | 5 | 0.12 |
| (1,1510) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD11 | 18 | 0.12 |
| (1,1510) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD12 | 18 | 0.12 |
| (1,1510) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD13 | 18 | 0.12 |
| (1,1510) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD21 | 18 | 0.12 |
| (1,1510) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD22 | 18 | 0.12 |
| (1,1510) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HD23 | 18 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 2 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 2 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 2 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 2 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 2 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 2 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 2 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 2 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 2 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 2 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 2 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 2 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 2 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 2 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 2 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 2 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 2 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 2 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 10 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 10 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 10 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 10 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 10 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 10 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 10 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 10 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 10 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 10 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 10 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 10 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 10 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 10 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 10 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 10 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 10 | 0.12 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 10 | 0.12 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE2 | 6 | 0.12 |
| (1,1500) | 1:A:28:LYS:HB2 | 1:A:28:LYS:HE3 | 6 | 0.12 |
| (1,1472) | 1:A:23:GLU:HB2 | 1:A:23:GLU:HG2 | 16 | 0.12 |
| (1,1472) | 1:A:23:GLU:HB2 | 1:A:23:GLU:HG3 | 16 | 0.12 |
| (1,1458) | 1:A:20:ASP:HB2 | 1:A:23:GLU:HB3 | 18 | 0.12 |
| (1,1458) | 1:A:20:ASP:HB3 | 1:A:23:GLU:HB3 | 18 | 0.12 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB1 | 6 | 0.12 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB2 | 6 | 0.12 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB3 | 6 | 0.12 |
| (1,1418) | 1:A:13:LYS:HG2 | 1:A:14:SER:H | 15 | 0.12 |
| (1,1418) | 1:A:13:LYS:HG3 | 1:A:14:SER:H | 15 | 0.12 |
| (1,1416) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:14:SER:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1416) | 1:A:13:LYS:HB3 | 1:A:14:SER:HA | 18 | 0.12 |
| (1,1414) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:14:SER:HB2 | 4 | 0.12 |
| (1,1414) | 1:A:13:LYS:HA | 1:A:14:SER:HB3 | 4 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB2 | 8 | 0.12 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB3 | 8 | 0.12 |
| (1,1388) | 1:A:6:LYS:HB2 | 1:A:7:LEU:H | 8 | 0.12 |
| (1,1388) | 1:A:6:LYS:HB3 | 1:A:7:LEU:H | 8 | 0.12 |
| (1,1353) | 1:A:35:LEU:HD11 | 1:A:36:ILE:H | 17 | 0.12 |
| (1,1353) | 1:A:35:LEU:HD12 | 1:A:36:ILE:H | 17 | 0.12 |
| (1,1353) | 1:A:35:LEU:HD13 | 1:A:36:ILE:H | 17 | 0.12 |
| (1,1340) | 1:A:84:LYS:HG3 | 1:A:85:LEU:H | 9 | 0.12 |
| (1,1338) | 1:A:89:HIS:H | 1:A:90:PRO:HA | 8 | 0.12 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG21 | 1 | 0.12 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG22 | 1 | 0.12 |
| (1,1335) | 1:A:42:GLN:H | 1:A:44:THR:HG23 | 1 | 0.12 |
| (1,1326) | 1:A:65:ARG:HG3 | 1:A:66:MET:H | 15 | 0.12 |
| (1,1299) | 1:A:4:MET:HE1 | 1:A:6:LYS:H | 11 | 0.12 |
| (1,1299) | 1:A:4:MET:HE2 | 1:A:6:LYS:H | 11 | 0.12 |
| (1,1299) | 1:A:4:MET:HE3 | 1:A:6:LYS:H | 11 | 0.12 |
| (1,1281) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:43:LEU:H | 4 | 0.12 |
| (1,1281) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:43:LEU:H | 6 | 0.12 |
| (1,1262) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HA | 10 | 0.12 |
| (1,1262) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HA | 12 | 0.12 |
| (1,1262) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HA | 14 | 0.12 |
| (1,1262) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1239) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:58:ALA:HA | 14 | 0.12 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 3 | 0.12 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 17 | 0.12 |
| (1,1202) | 1:A:76:LEU:HG | 1:A:77:GLU:H | 8 | 0.12 |
| (1,1186) | 1:A:39:TYR:HD1 | 1:A:75:ALA:HA | 1 | 0.12 |
| (1,1173) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:40:TYR:HE1 | 4 | 0.12 |
| (1,1173) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:40:TYR:HE1 | 17 | 0.12 |
| (1,1113) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:4:MET:HE1 | 7 | 0.12 |
| (1,1113) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:4:MET:HE2 | 7 | 0.12 |
| (1,1113) | 1:A:4:MET:HA | 1:A:4:MET:HE3 | 7 | 0.12 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:71:ALA:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:71:ALA:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:71:ALA:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1100) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:58:ALA:HA | 2 | 0.12 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 17 | 0.12 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 17 | 0.12 |
| (1,109) | 1:A:67:ASP:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 17 | 0.12 |
| (1,1085) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HA | 11 | 0.12 |
| (1,1085) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HA | 13 | 0.12 |
| (1,1085) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HA | 15 | 0.12 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 12 | 0.12 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 12 | 0.12 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 12 | 0.12 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 16 | 0.12 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 16 | 0.12 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 16 | 0.12 |
| (1,1062) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:58:ALA:HA | 20 | 0.12 |
| (1,1055) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:66:MET:HG3 | 13 | 0.12 |
| (1,1047) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HA | 11 | 0.12 |
| (1,1047) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HA | 15 | 0.12 |
| (1,1047) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HA | 17 | 0.12 |
| (1,1040) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HD3 | 1 | 0.12 |
| (1,1040) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HD3 | 14 | 0.12 |
| (1,1039) | 1:A:33:LYS:HA | 1:A:36:ILE:HB | 17 | 0.12 |
| (1,1008) | 1:A:34:HIS:HB3 | 1:A:35:LEU:HA | 16 | 0.12 |
| (1,1001) | 1:A:12:TRP:HB2 | 1:A:13:LYS:HA | 13 | 0.12 |
| (1,1001) | 1:A:12:TRP:HB2 | 1:A:13:LYS:HA | 14 | 0.12 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG21 | 5 | 0.11 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG22 | 5 | 0.11 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG23 | 5 | 0.11 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG21 | 14 | 0.11 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG22 | 14 | 0.11 |
| (1,988) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:HG23 | 14 | 0.11 |
| (1,986) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:HA | 12 | 0.11 |
| (1,986) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:HA | 18 | 0.11 |
| (1,986) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:HA | 19 | 0.11 |
| (1,986) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:HA | 20 | 0.11 |
| (1,978) | 1:A:86:CYS:HB2 | 1:A:87:ASP:HA | 8 | 0.11 |
| (1,974) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 11 | 0.11 |
| (1,974) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 18 | 0.11 |
| (1,972) | 1:A:47:CYS:HB2 | 1:A:88:PRO:HA | 15 | 0.11 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG21 | 1:A:74:LYS:HE3 | 6 | 0.11 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG22 | 1:A:74:LYS:HE3 | 6 | 0.11 |
| (1,967) | 1:A:73:ILE:HG23 | 1:A:74:LYS:HE3 | 6 | 0.11 |
| (1,947) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:42:GLN:HG3 | 11 | 0.11 |
| (1,941) | 1:A:23:GLU:HB2 | 1:A:27:MET:HG2 | 1 | 0.11 |
| (1,925) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:55:GLU:HA | 8 | 0.11 |
| (1,925) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:55:GLU:HA | 20 | 0.11 |
| (1,897) | 1:A:27:MET:HB2 | 1:A:28:LYS:HA | 11 | 0.11 |
| (1,897) | 1:A:27:MET:HB2 | 1:A:28:LYS:HA | 19 | 0.11 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB1 | 14 | 0.11 |
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB2 | 14 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,882) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HB3 | 14 | 0.11 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG21 | 7 | 0.11 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG22 | 7 | 0.11 |
| (1,88) | 1:A:53:THR:H | 1:A:53:THR:HG23 | 7 | 0.11 |
| (1,870) | 1:A:66:MET:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 18 | 0.11 |
| (1,841) | 1:A:25:SER:HA | 1:A:28:LYS:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,840) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:HA | 5 | 0.11 |
| (1,835) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:82:ASN:HA | 19 | 0.11 |
| (1,833) | 1:A:72:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:HB | 20 | 0.11 |
| (1,833) | 1:A:72:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:HB | 20 | 0.11 |
| (1,833) | 1:A:72:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:HB | 20 | 0.11 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB1 | 1 | 0.11 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,820) | 1:A:45:GLU:HB2 | 1:A:58:ALA:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD11 | 7 | 0.11 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD12 | 7 | 0.11 |
| (1,812) | 1:A:80:LYS:HG3 | 1:A:81:ILE:HD13 | 7 | 0.11 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG21 | 3 | 0.11 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG22 | 3 | 0.11 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG23 | 3 | 0.11 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG21 | 16 | 0.11 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG22 | 16 | 0.11 |
| (1,803) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:44:THR:HG23 | 16 | 0.11 |
| (1,791) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 2 | 0.11 |
| (1,791) | 1:A:77:GLU:HA | 1:A:80:LYS:HG3 | 20 | 0.11 |
| (1,788) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:HB1 | 15 | 0.11 |
| (1,788) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:HB2 | 15 | 0.11 |
| (1,788) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:70:ALA:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:71:ALA:HA | 9 | 0.11 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 9 | 0.11 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:71:ALA:HA | 9 | 0.11 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:71:ALA:HA | 14 | 0.11 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:71:ALA:HA | 14 | 0.11 |
| (1,784) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:71:ALA:HA | 14 | 0.11 |
| (1,769) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:24:ALA:HB1 | 18 | 0.11 |
| (1,769) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:24:ALA:HB2 | 18 | 0.11 |
| (1,769) | 1:A:21:ASP:HA | 1:A:24:ALA:HB3 | 18 | 0.11 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB1 | 20 | 0.11 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB2 | 20 | 0.11 |
| (1,768) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:30:ALA:HB3 | 20 | 0.11 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 5 | 0.11 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 5 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB1 | 6 | 0.11 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB2 | 6 | 0.11 |
| (1,765) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:72:ALA:HB3 | 6 | 0.11 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB1 | 11 | 0.11 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,746) | 1:A:44:THR:HB | 1:A:71:ALA:HB3 | 11 | 0.11 |
| (1,742) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 15 | 0.11 |
| (1,742) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 15 | 0.11 |
| (1,742) | 1:A:66:MET:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 15 | 0.11 |
| (1,739) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 14 | 0.11 |
| (1,739) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 14 | 0.11 |
| (1,739) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 14 | 0.11 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB1 | 5 | 0.11 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,735) | 1:A:41:HIS:HA | 1:A:71:ALA:HB3 | 5 | 0.11 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG21 | 9 | 0.11 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG22 | 9 | 0.11 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG23 | 9 | 0.11 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG21 | 12 | 0.11 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG22 | 12 | 0.11 |
| (1,723) | 1:A:52:CYS:HA | 1:A:53:THR:HG23 | 12 | 0.11 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD21 | 1:A:58:ALA:HA | 1 | 0.11 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD22 | 1:A:58:ALA:HA | 1 | 0.11 |
| (1,714) | 1:A:43:LEU:HD23 | 1:A:58:ALA:HA | 1 | 0.11 |
| (1,695) | 1:A:43:LEU:HG | 1:A:74:LYS:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,682) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 10 | 0.11 |
| (1,682) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 10 | 0.11 |
| (1,682) | 1:A:73:ILE:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 10 | 0.11 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG21 | 8 | 0.11 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG22 | 8 | 0.11 |
| (1,670) | 1:A:80:LYS:HA | 1:A:81:ILE:HG23 | 8 | 0.11 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD11 | 5 | 0.11 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD12 | 5 | 0.11 |
| (1,668) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HD13 | 5 | 0.11 |
| (1,655) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:78:LEU:HG | 4 | 0.11 |
| (1,640) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:83:ALA:HA | 3 | 0.11 |
| (1,640) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:83:ALA:HA | 3 | 0.11 |
| (1,640) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:83:ALA:HA | 3 | 0.11 |
| (1,640) | 1:A:81:ILE:HD11 | 1:A:83:ALA:HA | 18 | 0.11 |
| (1,640) | 1:A:81:ILE:HD12 | 1:A:83:ALA:HA | 18 | 0.11 |
| (1,640) | 1:A:81:ILE:HD13 | 1:A:83:ALA:HA | 18 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|---------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,625) | 1:A:75:ALA:HA | 1:A:78:LEU:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD11 | 10 | 0.11 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD12 | 10 | 0.11 |
| (1,617) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:36:ILE:HD13 | 10 | 0.11 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD11 | 15 | 0.11 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD12 | 15 | 0.11 |
| (1,615) | 1:A:35:LEU:HA | 1:A:85:LEU:HD13 | 15 | 0.11 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:25:SER:H | 6 | 0.11 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:25:SER:H | 6 | 0.11 |
| (1,57) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:25:SER:H | 6 | 0.11 |
| (1,565) | 1:A:49:ASN:H | 1:A:51:ALA:H | 12 | 0.11 |
| (1,553) | 1:A:5:GLU:H | 1:A:6:LYS:H | 9 | 0.11 |
| (1,55) | 1:A:22:ILE:H | 1:A:22:ILE:HD11 | 16 | 0.11 |
| (1,55) | 1:A:22:ILE:H | 1:A:22:ILE:HD12 | 16 | 0.11 |
| (1,55) | 1:A:22:ILE:H | 1:A:22:ILE:HD13 | 16 | 0.11 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:24:ALA:H | 9 | 0.11 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:24:ALA:H | 9 | 0.11 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:24:ALA:H | 9 | 0.11 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:24:ALA:H | 18 | 0.11 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:24:ALA:H | 18 | 0.11 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:24:ALA:H | 18 | 0.11 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG21 | 1:A:24:ALA:H | 19 | 0.11 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG22 | 1:A:24:ALA:H | 19 | 0.11 |
| (1,54) | 1:A:22:ILE:HG23 | 1:A:24:ALA:H | 19 | 0.11 |
| (1,509) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:56:PHE:H | 1 | 0.11 |
| (1,509) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:56:PHE:H | 13 | 0.11 |
| (1,509) | 1:A:54:ASN:H | 1:A:56:PHE:H | 15 | 0.11 |
| (1,506) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:CYS:H | 13 | 0.11 |
| (1,506) | 1:A:51:ALA:H | 1:A:52:CYS:H | 15 | 0.11 |
| (1,501) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:83:ALA:H | 20 | 0.11 |
| (1,462) | 1:A:39:TYR:HE2 | 1:A:82:ASN:H | 12 | 0.11 |
| (1,447) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:18:GLN:H | 8 | 0.11 |
| (1,440) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HA | 1 | 0.11 |
| (1,440) | 1:A:50:GLU:H | 1:A:51:ALA:HA | 2 | 0.11 |
| (1,421) | 1:A:24:ALA:HA | 1:A:25:SER:H | 17 | 0.11 |
| (1,420) | 1:A:48:GLY:HA3 | 1:A:89:HIS:H | 9 | 0.11 |
| (1,41) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:78:LEU:HG | 9 | 0.11 |
| (1,41) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:78:LEU:HG | 11 | 0.11 |
| (1,405) | 1:A:57:CYS:H | 1:A:65:ARG:HA | 8 | 0.11 |
| (1,399) | 1:A:26:ARG:HA | 1:A:28:LYS:H | 6 | 0.11 |
| (1,396) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:45:GLU:H | 3 | 0.11 |
| (1,396) | 1:A:43:LEU:HA | 1:A:45:GLU:H | 14 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,388) | 1:A:88:PRO:HD3 | 1:A:89:HIS:H | 8 | 0.11 |
| (1,367) | 1:A:41:HIS:HB3 | 1:A:45:GLU:H | 1 | 0.11 |
| (1,354) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:42:GLN:H | 12 | 0.11 |
| (1,354) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:42:GLN:H | 17 | 0.11 |
| (1,328) | 1:A:48:GLY:H | 1:A:49:ASN:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,327) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:50:GLU:H | 19 | 0.11 |
| (1,325) | 1:A:49:ASN:HB2 | 1:A:51:ALA:H | 4 | 0.11 |
| (1,324) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:H | 6 | 0.11 |
| (1,324) | 1:A:52:CYS:HB2 | 1:A:53:THR:H | 7 | 0.11 |
| (1,311) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:78:LEU:H | 12 | 0.11 |
| (1,307) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:47:CYS:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:81:ILE:H | 15 | 0.11 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:81:ILE:H | 15 | 0.11 |
| (1,3) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:81:ILE:H | 15 | 0.11 |
| (1,292) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:86:CYS:H | 11 | 0.11 |
| (1,287) | 1:A:42:GLN:HG3 | 1:A:58:ALA:H | 19 | 0.11 |
| (1,28) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:HB1 | 16 | 0.11 |
| (1,28) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:HB2 | 16 | 0.11 |
| (1,28) | 1:A:47:CYS:H | 1:A:58:ALA:HB3 | 16 | 0.11 |
| (1,275) | 1:A:56:PHE:HB3 | 1:A:57:CYS:H | 14 | 0.11 |
| (1,271) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:55:GLU:H | 4 | 0.11 |
| (1,271) | 1:A:54:ASN:HB3 | 1:A:55:GLU:H | 9 | 0.11 |
| (1,260) | 1:A:61:PRO:HB2 | 1:A:63:PHE:H | 5 | 0.11 |
| (1,243) | 1:A:37:GLU:HB2 | 1:A:39:TYR:H | 10 | 0.11 |
| (1,243) | 1:A:37:GLU:HB2 | 1:A:39:TYR:H | 14 | 0.11 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG21 | 1:A:72:ALA:H | 16 | 0.11 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG22 | 1:A:72:ALA:H | 16 | 0.11 |
| (1,23) | 1:A:44:THR:HG23 | 1:A:72:ALA:H | 16 | 0.11 |
| (1,229) | 1:A:26:ARG:H | 1:A:27:MET:HB3 | 2 | 0.11 |
| (1,226) | 1:A:76:LEU:H | 1:A:77:GLU:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,203) | 1:A:26:ARG:HB2 | 1:A:27:MET:H | 12 | 0.11 |
| (1,198) | 1:A:35:LEU:HG | 1:A:79:TYR:H | 10 | 0.11 |
| (1,184) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HB2 | 5 | 0.11 |
| (1,184) | 1:A:44:THR:H | 1:A:45:GLU:HB2 | 10 | 0.11 |
| (1,183) | 1:A:32:ALA:H | 1:A:35:LEU:HB2 | 12 | 0.11 |
| (1,181) | 1:A:65:ARG:H | 1:A:65:ARG:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,1718) | 1:A:89:HIS:HB2 | 1:A:90:PRO:HA | 5 | 0.11 |
| (1,1718) | 1:A:89:HIS:HB3 | 1:A:90:PRO:HA | 5 | 0.11 |
| (1,1709) | 1:A:86:CYS:HA | 1:A:87:ASP:HB2 | 1 | 0.11 |
| (1,1709) | 1:A:86:CYS:HA | 1:A:87:ASP:HB3 | 1 | 0.11 |
| (1,1700) | 1:A:84:LYS:HD2 | 1:A:85:LEU:H | 19 | 0.11 |
| (1,1700) | 1:A:84:LYS:HD3 | 1:A:85:LEU:H | 19 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,168) | 1:A:43:LEU:HB3 | 1:A:71:ALA:H | 18 | 0.11 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD11 | 1:A:80:LYS:H | 2 | 0.11 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD12 | 1:A:80:LYS:H | 2 | 0.11 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD13 | 1:A:80:LYS:H | 2 | 0.11 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD21 | 1:A:80:LYS:H | 2 | 0.11 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD22 | 1:A:80:LYS:H | 2 | 0.11 |
| (1,1678) | 1:A:76:LEU:HD23 | 1:A:80:LYS:H | 2 | 0.11 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD11 | 10 | 0.11 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD12 | 10 | 0.11 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD13 | 10 | 0.11 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD21 | 10 | 0.11 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD22 | 10 | 0.11 |
| (1,1661) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:76:LEU:HD23 | 10 | 0.11 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD2 | 1:A:66:MET:H | 19 | 0.11 |
| (1,1640) | 1:A:65:ARG:HD3 | 1:A:66:MET:H | 19 | 0.11 |
| (1,1634) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:HD2 | 16 | 0.11 |
| (1,1634) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:HD3 | 16 | 0.11 |
| (1,1634) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:HD2 | 16 | 0.11 |
| (1,1634) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:HD3 | 16 | 0.11 |
| (1,1634) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:HD2 | 16 | 0.11 |
| (1,1634) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:HD3 | 16 | 0.11 |
| (1,1634) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HD2 | 16 | 0.11 |
| (1,1634) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HD3 | 16 | 0.11 |
| (1,1634) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HD2 | 16 | 0.11 |
| (1,1634) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HD3 | 16 | 0.11 |
| (1,1634) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HD2 | 16 | 0.11 |
| (1,1634) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HD3 | 16 | 0.11 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD11 | 1:A:65:ARG:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD12 | 1:A:65:ARG:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD13 | 1:A:65:ARG:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD21 | 1:A:65:ARG:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD22 | 1:A:65:ARG:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,1632) | 1:A:64:LEU:HD23 | 1:A:65:ARG:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD11 | 16 | 0.11 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD12 | 16 | 0.11 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD13 | 16 | 0.11 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD21 | 16 | 0.11 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD22 | 16 | 0.11 |
| (1,1618) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:64:LEU:HD23 | 16 | 0.11 |
| (1,160) | 1:A:79:TYR:H | 1:A:80:LYS:HG3 | 15 | 0.11 |
| (1,1592) | 1:A:45:GLU:HA | 1:A:45:GLU:HG2 | 3 | 0.11 |
| (1,1592) | 1:A:45:GLU:HA | 1:A:45:GLU:HG3 | 3 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|----------------|-----------------|----------|---------------|
| (1,1592) | 1:A:45:GLU:HA | 1:A:45:GLU:HG2 | 5 | 0.11 |
| (1,1592) | 1:A:45:GLU:HA | 1:A:45:GLU:HG3 | 5 | 0.11 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG2 | 11 | 0.11 |
| (1,1584) | 1:A:44:THR:HA | 1:A:45:GLU:HG3 | 11 | 0.11 |
| (1,1521) | 1:A:33:LYS:HB2 | 1:A:34:HIS:HA | 15 | 0.11 |
| (1,1521) | 1:A:33:LYS:HB3 | 1:A:34:HIS:HA | 15 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD11 | 3 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD12 | 3 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD13 | 3 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD21 | 3 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD22 | 3 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB1 | 1:A:35:LEU:HD23 | 3 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD11 | 3 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD12 | 3 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD13 | 3 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD21 | 3 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD22 | 3 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB2 | 1:A:35:LEU:HD23 | 3 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD11 | 3 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD12 | 3 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD13 | 3 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD21 | 3 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD22 | 3 | 0.11 |
| (1,1509) | 1:A:31:ALA:HB3 | 1:A:35:LEU:HD23 | 3 | 0.11 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE2 | 17 | 0.11 |
| (1,1498) | 1:A:28:LYS:HA | 1:A:28:LYS:HE3 | 17 | 0.11 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD2 | 16 | 0.11 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG2 | 1:A:26:ARG:HD3 | 16 | 0.11 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD2 | 16 | 0.11 |
| (1,1477) | 1:A:23:GLU:HG3 | 1:A:26:ARG:HD3 | 16 | 0.11 |
| (1,1450) | 1:A:19:SER:HB2 | 1:A:22:ILE:HB | 11 | 0.11 |
| (1,1450) | 1:A:19:SER:HB3 | 1:A:22:ILE:HB | 11 | 0.11 |
| (1,1431) | 1:A:16:GLU:HB2 | 1:A:17:PRO:HD2 | 5 | 0.11 |
| (1,1431) | 1:A:16:GLU:HB2 | 1:A:17:PRO:HD3 | 5 | 0.11 |
| (1,1431) | 1:A:16:GLU:HB3 | 1:A:17:PRO:HD2 | 5 | 0.11 |
| (1,1431) | 1:A:16:GLU:HB3 | 1:A:17:PRO:HD3 | 5 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB1 | 12 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB2 | 12 | 0.11 |
| (1,143) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB3 | 12 | 0.11 |
| (1,1416) | 1:A:13:LYS:HB2 | 1:A:14:SER:HA | 14 | 0.11 |
| (1,1416) | 1:A:13:LYS:HB3 | 1:A:14:SER:HA | 14 | 0.11 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB2 | 9 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB3 | 9 | 0.11 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB2 | 17 | 0.11 |
| (1,1405) | 1:A:12:TRP:HA | 1:A:13:LYS:HB3 | 17 | 0.11 |
| (1,140) | 1:A:68:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB1 | 3 | 0.11 |
| (1,140) | 1:A:68:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB2 | 3 | 0.11 |
| (1,140) | 1:A:68:ASN:H | 1:A:70:ALA:HB3 | 3 | 0.11 |
| (1,1386) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:6:LYS:HG2 | 3 | 0.11 |
| (1,1386) | 1:A:6:LYS:H | 1:A:6:LYS:HG3 | 3 | 0.11 |
| (1,1326) | 1:A:65:ARG:HG3 | 1:A:66:MET:H | 9 | 0.11 |
| (1,1282) | 1:A:10:CYS:HA | 1:A:11:TYR:H | 1 | 0.11 |
| (1,1282) | 1:A:10:CYS:HA | 1:A:11:TYR:H | 20 | 0.11 |
| (1,1281) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:43:LEU:H | 10 | 0.11 |
| (1,1281) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:43:LEU:H | 16 | 0.11 |
| (1,1281) | 1:A:39:TYR:HB3 | 1:A:43:LEU:H | 20 | 0.11 |
| (1,1262) | 1:A:53:THR:H | 1:A:54:ASN:HA | 3 | 0.11 |
| (1,1227) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:ASN:HA | 12 | 0.11 |
| (1,1227) | 1:A:81:ILE:H | 1:A:82:ASN:HA | 15 | 0.11 |
| (1,1220) | 1:A:79:TYR:HA | 1:A:81:ILE:H | 11 | 0.11 |
| (1,1208) | 1:A:70:ALA:HB1 | 1:A:73:ILE:H | 16 | 0.11 |
| (1,1208) | 1:A:70:ALA:HB2 | 1:A:73:ILE:H | 16 | 0.11 |
| (1,1208) | 1:A:70:ALA:HB3 | 1:A:73:ILE:H | 16 | 0.11 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 10 | 0.11 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 13 | 0.11 |
| (1,1205) | 1:A:77:GLU:H | 1:A:77:GLU:HG2 | 15 | 0.11 |
| (1,1204) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:H | 8 | 0.11 |
| (1,1202) | 1:A:76:LEU:HG | 1:A:77:GLU:H | 4 | 0.11 |
| (1,1202) | 1:A:76:LEU:HG | 1:A:77:GLU:H | 6 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB1 | 1:A:79:TYR:HD1 | 18 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB2 | 1:A:79:TYR:HD1 | 18 | 0.11 |
| (1,1193) | 1:A:32:ALA:HB3 | 1:A:79:TYR:HD1 | 18 | 0.11 |
| (1,1191) | 1:A:76:LEU:HD11 | 1:A:79:TYR:HD1 | 18 | 0.11 |
| (1,1191) | 1:A:76:LEU:HD12 | 1:A:79:TYR:HD1 | 18 | 0.11 |
| (1,1191) | 1:A:76:LEU:HD13 | 1:A:79:TYR:HD1 | 18 | 0.11 |
| (1,1173) | 1:A:40:TYR:HA | 1:A:40:TYR:HE1 | 7 | 0.11 |
| (1,1163) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:79:TYR:HE2 | 2 | 0.11 |
| (1,1163) | 1:A:32:ALA:HA | 1:A:79:TYR:HE2 | 20 | 0.11 |
| (1,1151) | 1:A:11:TYR:HA | 1:A:11:TYR:HE1 | 1 | 0.11 |
| (1,1124) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:22:ILE:HB | 7 | 0.11 |
| (1,1124) | 1:A:20:ASP:HA | 1:A:22:ILE:HB | 12 | 0.11 |
| (1,1111) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HA | 5 | 0.11 |
| (1,1111) | 1:A:78:LEU:HA | 1:A:81:ILE:HA | 20 | 0.11 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:71:ALA:HA | 7 | 0.11 |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key | Atom-1 | Atom-2 | Model ID | Violation (Å) |
|----------|-----------------|----------------|----------|---------------|
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:71:ALA:HA | 7 | 0.11 |
| (1,1104) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:71:ALA:HA | 7 | 0.11 |
| (1,1100) | 1:A:57:CYS:HA | 1:A:58:ALA:HA | 18 | 0.11 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 13 | 0.11 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 13 | 0.11 |
| (1,110) | 1:A:69:ASN:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 13 | 0.11 |
| (1,1085) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HA | 1 | 0.11 |
| (1,1085) | 1:A:39:TYR:HA | 1:A:75:ALA:HA | 17 | 0.11 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB1 | 4 | 0.11 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB2 | 4 | 0.11 |
| (1,108) | 1:A:66:MET:H | 1:A:71:ALA:HB3 | 4 | 0.11 |
| (1,1056) | 1:A:65:ARG:HA | 1:A:66:MET:HG3 | 17 | 0.11 |
| (1,1054) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:65:ARG:HA | 6 | 0.11 |
| (1,1047) | 1:A:74:LYS:HA | 1:A:77:GLU:HA | 19 | 0.11 |
| (1,1040) | 1:A:87:ASP:HB2 | 1:A:88:PRO:HD3 | 16 | 0.11 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE1 | 1:A:75:ALA:HA | 6 | 0.11 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE2 | 1:A:75:ALA:HA | 6 | 0.11 |
| (1,1037) | 1:A:66:MET:HE3 | 1:A:75:ALA:HA | 6 | 0.11 |
| (1,1034) | 1:A:16:GLU:HA | 1:A:17:PRO:HD2 | 1 | 0.11 |
| (1,1029) | 1:A:89:HIS:HA | 1:A:90:PRO:HD2 | 11 | 0.11 |
| (1,1017) | 1:A:56:PHE:HA | 1:A:57:CYS:HB2 | 11 | 0.11 |
| (1,1012) | 1:A:39:TYR:HB2 | 1:A:79:TYR:HA | 9 | 0.11 |
| (1,1) | 1:A:78:LEU:HD21 | 1:A:82:ASN:H | 14 | 0.11 |
| (1,1) | 1:A:78:LEU:HD22 | 1:A:82:ASN:H | 14 | 0.11 |
| (1,1) | 1:A:78:LEU:HD23 | 1:A:82:ASN:H | 14 | 0.11 |

10 Dihedral-angle violation analysis

Dihedral angle analysis failed due to data error in the dihedral angle restraints, possibly missing target value